



저작자표시-비영리-변경금지 2.0 대한민국

이용자는 아래의 조건을 따르는 경우에 한하여 자유롭게

- 이 저작물을 복제, 배포, 전송, 전시, 공연 및 방송할 수 있습니다.

다음과 같은 조건을 따라야 합니다:



저작자표시. 귀하는 원저작자를 표시하여야 합니다.



비영리. 귀하는 이 저작물을 영리 목적으로 이용할 수 없습니다.



변경금지. 귀하는 이 저작물을 개작, 변형 또는 가공할 수 없습니다.

- 귀하는, 이 저작물의 재이용이나 배포의 경우, 이 저작물에 적용된 이용허락조건을 명확하게 나타내어야 합니다.
- 저작권자로부터 별도의 허가를 받으면 이러한 조건들은 적용되지 않습니다.

저작권법에 따른 이용자의 권리는 위의 내용에 의하여 영향을 받지 않습니다.

이것은 [이용허락규약\(Legal Code\)](#)을 이해하기 쉽게 요약한 것입니다.

[Disclaimer](#)

약학박사 학위논문

포공영의 화학성분 및 알파글루코시데이즈

억제 활성

**Chemical Constituents from *Taraxacum officinale* and
Their α -Glucosidase Inhibitory Activity**

2018년 2월

서울대학교 大學院

藥學科 生藥學 專攻

崔 長 圭

목차

I. 서론	3
1. 연구의 배경.....	3
1.1 당뇨병과 치료법	3
1.2 포공영 (Taraxaci Herba)	6
1.3 민들레속 식물의 식물화학적 연구	8
1.3.1. Sesquiterpene	8
1.3.2. Triterpene	10
1.3.3. 페놀성 화합물	11
1.3.4. Inositol	13
1.3.5. 기타 화합물	15
2. 연구의 목적.....	16
II. 실험 재료 및 방법	19
1. 재료	19
2. 방법	21
2.1 추출 및 분획.....	21
2.2 분리 및 정제.....	22
2.3 알파글루코시데이즈 억제 활성	59
III. 결과 및 고찰.....	60
1. 화합물 구조동정.....	60
1.1 화합물 1의 구조	60
1.2 화합물 2의 구조	67
1.3 화합물 3의 구조	74

1.4	화합물 4의 구조	80
1.5	화합물 5의 구조	87
1.6	화합물 6의 구조	94
1.7	화합물 7의 구조	100
1.8	화합물 8의 구조	108
1.9	화합물 9의 구조	115
1.10	화합물 10의 구조	123
1.11	화합물 11의 구조	126
1.12	화합물 12의 구조	129
1.13	화합물 13의 구조	132
1.14	화합물 14의 구조	135
1.15	화합물 15의 구조	138
1.16	화합물 16, 17, 18, 19의 구조	144
1.17	화합물 20, 23의 구조	154
1.18	화합물 21, 22의 구조	160
1.19	화합물 24의 구조	166
1.20	화합물 25, 26, 27, 28의 구조	169
1.21	화합물 29, 30의 구조	179
1.22	화합물 31의 구조	185
1.23	화합물 32, 33의 구조	188
1.24	화합물 34, 35, 36의 구조	194
1.25	화합물 37, 48의 구조	202
1.26	화합물 39, 40의 구조	207

1.27 화합물 43의 구조	213
1.28 화합물 44, 45의 구조	216
1.29 화합물 38, 41, 42, 46, 47, 49의 구조.....	221
2. 알파글루코시데이즈 억제활성.....	238
2.1 알파글루코시데이즈 억제활성	238
2.2 알파글루코시데이즈 억제유형	240
IV. 결론.....	241
V. 참고문헌.....	242
국문초록.....	254
부록	257

List of schemes

Scheme 1. Extraction and fractionation of <i>T. officinale</i>	21
Scheme 2. Isolation of compounds from the CHCl ₃ soluble extract of <i>T. officinale</i>	24
Scheme 3. Isolation of compounds from the EA soluble extract of <i>T. officinale</i> ..	26
Scheme 4. Isolation of compounds from the BuOH soluble extract of <i>T. officinale</i>	29

List of tables

Table 1. Classification for the anti-diabetes agents.	5
Table 2. Pharmacological studies reported in the genus <i>Taraxacum</i>	7
Table 3. ¹ H NMR data of inositols.	14
Table 4. Chemical constituents from <i>Taraxacum officinale</i> related with antidiabetes action.	17
Table 5. ¹ H NMR (500 MHz) data of butyrolactone and butanoate derivatives ...	45
Table 6. ¹³ C NMR (125 MHz) data of butyrolactone and butanoate derivatives ..	46
Table 7. ¹ H NMR (500 MHz) data of inositol derivatives	47
Table 8. ¹³ C NMR (125 MHz) data of inositol derivatives	48
Table 9 ¹ H NMR (500 MHz) data of flavonoids	49
Table 10. ¹³ C NMR (125 MHz) data of flavonoids	49
Table 11. ¹ H NMR (500 MHz) data of flavonoids	50
Table 12. ¹³ C NMR (125 MHz) data of flavonoid derivatives	51
Table 13 . ¹ H NMR (500 MHz) data of flavonoid glycosides	52
Table 14. ¹³ C NMR (125 MHz) data of flavonoid glycosides	53
Table 15. ¹ H NMR (500 MHz) data of megastigmane and sesquiterpene derivatives	54
Table 16. ¹³ C NMR (125 MHz) data of megastigmane and sesquiterpene derivatives	55
Table 17. ¹ H NMR (500 MHz) data of others (1).....	56
Table 18. ¹³ C NMR (125 MHz) data of others (1).....	57
Table 19. ¹ H NMR (125 MHz) data of others (2).....	58
Table 20. ¹³ C NMR (125 MHz) data of others (2).....	59

List of figures

Fig. 1-1. Structure of sesquiterpenes reported in the genus <i>Taraxacum</i>	9
Fig. 1-2. Structure of triterpenes reported in the genus <i>Taraxacum</i>	11
Fig. 2-1. Structure of phenolic derivatives reported in the genus <i>Taraxacum</i>	12
Fig. 2-2. Structure of inositol derivatives reported in the genus <i>Taraxacum</i>	14
Fig. 2-3. Structure of miscellaneous compounds reported in the genus <i>Taraxacum</i>	16
Fig. 3. Structure of basic inositols	13
Fig. 4. ¹ H-NMR spectrum of compound 1	63
Fig. 5. ¹³ C-NMR spectrum of compound 1	64
Fig. 6. ¹ H- ¹ H COSY spectrum of compound 1	65
Fig. 7. HSQC spectrum of compound 1	66
Fig. 8. HMBC spectrum of compound 1	67
Fig. 9. ¹ H-NMR spectrum of compound 2	70
Fig. 10. ¹³ C-NMR spectrum of compound 2	71
Fig. 11. ¹ H- ¹ H COSY spectrum of compound 2	72
Fig. 12. HSQC spectrum of compound 2	73
Fig. 13. HMBC spectrum of compound 2	74
Fig. 14. ¹ H-NMR spectrum of compound 3	76
Fig. 15. ¹³ C-NMR spectrum of compound 3	77
Fig. 16. ¹ H- ¹ H COSY spectrum of compound 3	78
Fig. 17. HSQC spectrum of compound 3	79
Fig. 18. HMBC spectrum of compound 3	80
Fig. 19. ¹ H-NMR spectrum of compound 4	83
Fig. 20. ¹³ C-NMR spectrum of compound 4	84
Fig. 21. ¹ H- ¹ H COSY spectrum of compound 4	85
Fig. 22. HSQC spectrum of compound 4	86
Fig. 23. HMBC spectrum of compound 4	87
Fig. 24. ¹ H-NMR spectrum of compound 5	90
Fig. 25. ¹³ C-NMR spectrum of compound 5	91

Fig. 26. ^1H - ^1H COSY spectrum of compound 5	92
Fig. 27. HSQC spectrum of compound 5	93
Fig. 28. HMBC spectrum of compound 5	94
Fig. 29. ^1H -NMR spectrum of compound 6	96
Fig. 30. ^{13}C -NMR spectrum of compound 6	97
Fig. 31. ^1H - ^1H COSY spectrum of compound 6	98
Fig. 32. HSQC spectrum of compound 6	99
Fig. 33. HMBC spectrum of compound 6	100
Fig. 34. ^1H -NMR spectrum of compound 7	103
Fig. 35. ^{13}C -NMR spectrum of compound 7	104
Fig. 36. ^1H - ^1H COSY spectrum of compound 7	105
Fig. 37. HSQC spectrum of compound 7	106
Fig. 38. HMBC spectrum of compound 7	107
Fig. 39. ^1H -NMR spectra of inositol of 7 and <i>chiro</i> -inositol standard	108
Fig. 40. ^1H -NMR spectrum of compound 8	110
Fig. 41. ^{13}C -NMR spectrum of compound 8	111
Fig. 42. ^1H - ^1H COSY spectrum of compound 8	112
Fig. 43. HSQC spectrum of compound 8	113
Fig. 44. HMBC spectrum of compound 8	114
Fig. 45. H-NMR spectra of inositol of 8 and <i>chiro</i> -inositol standard	115
Fig. 46. ^1H -NMR spectrum of compound 9	118
Fig. 47. ^{13}C -NMR spectrum of compound 9	119
Fig. 48. ^1H - ^1H COSY spectrum of compound 9	120
Fig. 49. HSQC spectrum of compound 9	121
Fig. 50. HMBC spectrum of compound 9	122
Fig. 51. H-NMR spectra of inositol of 9 and <i>chiro</i> -inositol standard	123
Fig. 52. ^1H -NMR spectrum of compound 10	125
Fig. 53. ^{13}C -NMR spectrum of compound 10	126
Fig. 54. ^1H -NMR spectrum of compound 11	128
Fig. 55. ^{13}C -NMR spectrum of compound 11	129
Fig. 56. ^1H -NMR spectrum of compound 12	131

Fig. 57. ^{13}C -NMR spectrum of compound 12	132
Fig. 58. ^1H -NMR spectrum of compound 13	134
Fig. 59. ^{13}C -NMR spectrum of compound 13	135
Fig. 60. ^1H -NMR spectrum of compound 14	137
Fig. 61. ^{13}C -NMR spectrum of compound 14	138
Fig. 62. ^1H -NMR spectrum of compound 15	140
Fig. 63. ^{13}C -NMR spectrum of compound 15	141
Fig. 64. ^1H - ^1H COSY spectrum of compound 15	142
Fig. 65. HSQC spectrum of compound 15	143
Fig. 66. HMBC spectrum of compound 15	144
Fig. 67. ^1H -NMR spectrum of compound 16	147
Fig. 68. ^{13}C -NMR spectrum of compound 16	148
Fig. 69. ^1H -NMR spectrum of compound 17	149
Fig. 70. ^{13}C -NMR spectrum of compound 17	150
Fig. 71. ^1H -NMR spectrum of compound 18	151
Fig. 72. ^{13}C -NMR spectrum of compound 18	152
Fig. 73. ^1H -NMR spectrum of compound 19	153
Fig. 74. ^{13}C -NMR spectrum of compound 19	154
Fig. 75. ^1H -NMR spectrum of compound 20	157
Fig. 76. ^{13}C -NMR spectrum of compound 20	158
Fig. 77. ^1H -NMR spectrum of compound 23	159
Fig. 78. ^{13}C -NMR spectrum of compound 23	160
Fig. 79. ^1H -NMR spectrum of compound 21	163
Fig. 80. ^{13}C -NMR spectrum of compound 21	164
Fig. 81. ^1H -NMR spectrum of compound 22	165
Fig. 82. ^{13}C -NMR spectrum of compound 22	166
Fig. 83. ^1H -NMR spectrum of compound 24	168
Fig. 84. ^{13}C -NMR spectrum of compound 24	169
Fig. 85. ^1H -NMR spectrum of compound 25	172
Fig. 86. ^{13}C -NMR spectrum of compound 25	173
Fig. 87. ^1H -NMR spectrum of compound 26	174

Fig. 88. ^{13}C -NMR spectrum of compound 26	175
Fig. 89. ^1H -NMR spectrum of compound 27	176
Fig. 90. ^{13}C -NMR spectrum of compound 27	177
Fig. 91. ^1H -NMR spectrum of compound 28	178
Fig. 92. ^{13}C -NMR spectrum of compound 28	179
Fig. 93. ^1H -NMR spectrum of compound 29	182
Fig. 94. ^{13}C -NMR spectrum of compound 29	183
Fig. 95. ^1H -NMR spectrum of compound 30	184
Fig. 96. ^{13}C -NMR spectrum of compound 30	185
Fig. 97. ^1H -NMR spectrum of compound 31	187
Fig. 98. ^{13}C -NMR spectrum of compound 31	188
Fig. 99. ^1H -NMR spectrum of compound 32	191
Fig. 100. ^{13}C -NMR spectrum of compound 32	192
Fig. 101. ^1H -NMR spectrum of compound 33	193
Fig. 102. ^{13}C -NMR spectrum of compound 33	194
Fig. 103. ^1H -NMR spectrum of compound 34	197
Fig. 104. ^{13}C -NMR spectrum of compound 34	198
Fig. 105. ^1H -NMR spectrum of compound 35	199
Fig. 106. ^{13}C -NMR spectrum of compound 35	200
Fig. 107. ^1H -NMR spectrum of compound 36	201
Fig. 108. ^{13}C -NMR spectrum of compound 36	202
Fig. 109. ^1H -NMR spectrum of compound 37	204
Fig. 110. ^{13}C -NMR spectrum of compound 37	205
Fig. 111. ^1H -NMR spectrum of compound 48	206
Fig. 112. ^{13}C -NMR spectrum of compound 48	207
Fig. 113. ^1H -NMR spectrum of compound 39	210
Fig. 114. ^{13}C -NMR spectrum of compound 39	211
Fig. 115. ^1H -NMR spectrum of compound 40	212
Fig. 116. ^{13}C -NMR spectrum of compound 40	213
Fig. 117. ^1H -NMR spectrum of compound 43	215
Fig. 118. ^{13}C -NMR spectrum of compound 43	216

Fig. 119. ^1H -NMR spectrum of compound 44	218
Fig. 120. ^{13}C -NMR spectrum of compound 44	219
Fig. 121. ^1H -NMR spectrum of compound 45	220
Fig. 122. ^{13}C -NMR spectrum of compound 45	221
Fig. 123. ^1H -NMR spectrum of compound 38	225
Fig. 124. ^{13}C -NMR spectrum of compound 38	226
Fig. 125. ^1H -NMR spectrum of compound 41	227
Fig. 126. ^{13}C -NMR spectrum of compound 41	228
Fig. 127. ^1H -NMR spectrum of compound 42	229
Fig. 128. ^{13}C -NMR spectrum of compound 42	230
Fig. 129. ^1H -NMR spectrum of compound 46	231
Fig. 130. ^{13}C -NMR spectrum of compound 46	232
Fig. 131. ^1H -NMR spectrum of compound 47	233
Fig. 132. ^{13}C -NMR spectrum of compound 47	234
Fig. 133. ^1H -NMR spectrum of compound 49	235
Fig. 134. ^{13}C -NMR spectrum of compound 49	236
Fig. 135. Isolated compounds from <i>T. officinale</i> (continued)	237
Fig. 136. Isolated compounds from <i>T. officinale</i>	238
Fig. 137. Lineweaver-Burk plots for the inhibition of α -glucosidase in the compound 2 , 9 , 10 , 11 , 19 , 24 and acarbose	241

List of abbreviations

$[\alpha]_D$: specific optical rotation

C.C: column chromatography

CD: circular dichroism

CHCl_3 : chloroform

COSY: correlation spectroscopy

d: doublet

DMSO: dimethyl sulfoxide

EA: ethyl acetate

HMBC: heteronuclear multiple bond correlation

HPLC: high performance liquid chromatography

HSQC: heteronuclear single quantum coherence

HRESIMS: high resolution electrospray ionization mass

Hz: hertz

IC_{50} : the half maximal inhibitory concentration

m: multiplet

MeCN: acetonitrile

MeOH: methanol

MTPA: α -methoxy- α -trifluoromethylphenylacetyl

n-BuOH: *n*-butanol

NMR: nuclear magnetic resonance

PBS: phosphate-buffered saline

Q-TOF: quadrupole-time of flight

RP: reversed phase

s: singlet

t: triplet

UV: ultraviolet

I. 서론

1. 연구의 배경

1.1 당뇨병과 치료법

당뇨(糖尿)란 혈액중의 포도당이 소변으로 나오기 때문에 붙여진 이름이다. 인간이 섭취한 포도당은 소장에서 흡수가 되어 인슐린에 의해 세포에서 사용된다. 인슐린 분비가 제대로 되지 않거나, 제 기능을 하지 못하면서 높은 혈당수치가 지속되는 대사질환을 당뇨병이라 한다 (Kim et al., 2017). 이 대사성질환은 현대사회의 심각한 건강문제이며, 우리나라도 에너지 과잉섭취, 운동부족, 스트레스 등의 이유로 당뇨병 인구가 크게 증가하고 있다. 당뇨병은 일반적으로 두 가지로 분류할 수 있는데, 제I형 당뇨병은 충분한 인슐린을 생산하지 못하여 발생하며 ‘인슐린의존당뇨병’이라고 부른다. 제II형 당뇨병은 세포가 인슐린에 반응하지 않는 인슐린 저항성에 의해 발생하며 ‘인슐린비의존당뇨병’이라고 부른다. 특히 제II형 당뇨병은 전체 당뇨병환자의 약 90%를 차지하며, 비만, 운동부족 등과 같은 생활방식요소가 발생원인으로 ‘성인당뇨병’이라고도 부른다.

특징	제I형 당뇨병	제II형 당뇨병
발현	급성	점진적
발현 연령	대부분 어린이	대부분 어른
체격	마르거나 보통	종종 비만
자가항체	보통 존재	결여
내인성 인슐린	적거나 결여	보통, 감소
유병률	~10%	~90%

당뇨병의 3 대 증상은 다뇨 (多尿), 다음 (多飲), 다식 (多食) 이다. 고혈당 상태가 지속되면 소변으로 당이 빠져나가게 되고, 이로 인해 수분을 더욱 보충하게 되며, 이로 인한 에너지 부족으로 더욱 많이 먹게 되는 악순환에 빠지게 되는 것이다. 결과적으로 혈관, 신경, 근육등과 같은 여러 장기의 손상을 유발하며, 합병증의 원인이 된다 (Kaltoh et al., 2014, Zhang et al., 2017).

당뇨병 치료방법으로는 인슐린주사와 경구형 약물이 있다. 인슐린주사의 경우 주로 제I형 당뇨병환자와 경구형 약물로 혈당이 조절이 되지 않는 환자가 사용한다. 경구형 약물은 크게 세 종류로 나눌 수 있다 (Table 1.). 인슐린 분비촉진제 (sulfonylurea 와 meglinide 계)는 당뇨에 가장 많이 사용되는 약물이며, 베타세포의 인슐린분비를 촉진 시킴으로써 혈당을 조절한다 (Ripsin et al., 2009, Ikeda et al., 2017). 단점으로는 진단 초기인 환자에게만 효과적이며, 급성저혈당을 유발할 수 있다. 인슐린 저항성을 개선하는 약물로는 근육에서의 당 흡수와 이용을 증가시키는 biguanide 계 약물과 peroxisome proliferators-activated receptor γ 를 자극하여 체내 인슐린 감수성을 향상시키는 thiazolidine 계 약물이 있으나, 이들은 신기능 저하 혹은 부종, 체중증가 등의 심각한 부작용이 있다 (Krentz and Bailey, 2005).

알파글루코시데이즈 억제제는 소장에서 다당류 분해효소를 억제하여 장에서 탄수화물 흡수를 지연시키며, 현재 acarbose 와 voglibose 가 임상으로 쓰이고 있다. 알파글루코시데이즈 억제제의 장점은 식후

혈당조절이 되지 않는 환자에게 효과적으로 사용할 수 있으며, 체중에 영향을 주지 않고 중성지방을 저하시키는 효과가 있다는 점이다 (van de Laar et al., 2005, Satoh et al., 2015, Vichayanrat et al., 2002). 복통, 가스, 설사 등과 같은 소화기 부작용이 있지만, 다른 계열의 약물에 비해 상대적으로 부작용이 가벼운 편이다.

Table 1. Classification for the anti-diabetes agents.

구분	종류	작용기전	일반명
인슐린 분비 촉진	sulfonylurea	이자 β 세포에 결합해서 인슐린 분비를 촉진	glibenclamide
			gliclazide
			glimepiride
	속효형 인슐린 분비 촉진제	이자 β 세포막상의 SU 수용체에 결합해서 인슐린 분비를 촉진(속효성)	nateglinide
			mitiglinide
			calcium hydrate
식후 고혈당 개선	α -glucosidase 억제제	당의 소화를 억제해서 흡수를 지연	acarbose
			voglibose
인슐린 저항성 개선	biguanide 계	간에서 당생성을 억제하여 인슐린 감수성을 개선	metformin
			hydrochloride
			buformin
			hydrochloride
	thiazolidine 계	인슐린 저항성을 개선	pioglitazone
			hydrochloride

1.2 포공영 (*Taraxaci Herba*)

민들레는 다년생 국화과 식물로서, 주로 따뜻한 북반구 쪽에 분포한다 (Kisiel and Michalska, 2005). 뿌리의 길이가 일반적으로 15-30 cm 정도되며, 초록색 잎이 5-40 cm까지 자란다. 두상화서 노란색 꽃이 5-40 cm 길이로 자라며, 일반적으로 한 뿌리에 5-10개의 꽃이 핀다. 꽃잎이 흰색 혹은 갈색 씨앗으로 변하며 바람에 의해 퍼지게 된다.

국내에서는 민들레 (*Taraxacum platycarpum* Dahlst.)와 서양민들레 (*Taraxacum officinale* F.H. Wigg) 두 기원식물이 대부분인데, 특히 서양민들레가 압도적으로 많이 존재한다. 서양민들레는 본래 유럽지역에 많이 분포하며 전통약으로 사용되었으나, 본래 전세계에 분포하는 식물이다. 두 민들레의 외관적 차이로는 총포를 볼 수 있는데 민들레는 총포가 밀착되어 있고 서양민들레는 총포가 젖혀있는 것이 차이점이다.



T. platycarpum



T. officinale

민들레가 약용식물로서 사용된 첫 기록은 10-11세기 아랍지역에서 간과 비장을 치료했다는 기록이 있다 (Sweeny et al., 2005). 16세기부터 본격적으로 유럽지역에서 약용식물로 사용되었으며 주로 위장약, 간장약 등으로 사용되었는데, 특히 꽃 부분이 이담작용으로 뛰어난 효과가

있었다고 한다. 혈관청소, 관절염, 습진 등에도 효능을 보여 평상시에 주스나 식품으로도 섭취하였다 (Weiss and Fintelmann, 2000). 북미지역에서는 민들레 즙을 신장장애, 소화불량 그리고 당뇨병치료에도 사용하였다는 기록이 있다 (Hernandez-Galicia et al., 2002). 중국에서는 전통적으로 간염과 면역력향상을 위해 민들레와 다른 약제들을 조합하여 사용하였다 (Leu et al., 2003, Sweeney et al., 2005). 이와 같은 근거로 민들레의 활성화에 대한 많은 연구가 진행되었고, 그 결과를 table 2.에 정리하였다.

포공영 (蒲公英)은 KHP, CP 등재 생약이며, 민들레 (*T. platycarpum*), 흰민들레 (*T. coreanum* Nakai), 서양민들레 (*T. officinale*)의 전초이다. 맛은苦, 성질이 寒하기 때문에 해열, 발한, 소염, 건위, 이뇨, 최유약으로 전통적으로 사용하였다. 특히 소화불량과 급성 활달성 간염, 급성 편도선염, 급성 유선염에 포공영탕(蒲公英湯)으로 음용하였다.

Table 2. Pharmacological studies reported in the genus *Taraxacum*.

Pharmacological target	Extracts/compounds	Reference
Diuretic activity	aqueous extract	(Racz-Kotilla et al., 1974)
	petrol ether fraction and methanol fractions	(Hook et al., 1993)
Choleretic activity	alcoholic extract	(Bussemaker, 1936)
	aqueous leaf extract	(Pirtkien et al., 1960)
Hepatoprotective activity	aqueous leaf extract	(Hfaiedh et al., 2014)
Anti-inflammatory activity	aqueous leaf extract	(Seo et al., 2005)
	partitioned fraction	(Kashiwada et al., 2001)
	leaf extract	(Kim et al., 2000)

	methanolic extract	(Yasukawa et al., 1996)
Anti-oxidative activity	luteolin and luteolin 7- <i>O</i> -glucoside	(Hu and Kitts., 2004)
	partitioned fraction	(Kaurinovic et al., 2003).
	aqueous leaf extract	(Hagymasi et al., 2000)
Anti-carcinogenic activity	taraxinic acid	(Choi et al., 2002)
	aqueous extract	(Koo et al., 2004)
	aqueous extract	(Kim et al., 1998, 1999).
	ethanolic extract	(Ko et al., 2004)
Anti-allergic activity	desacetylmatricarin	(Ho et al., 1998)
Anti-hyperglycemic activity	ethanolic extract	(Hussain et al., 2004).
	ethanolic extract	(Petlevski et al., 2003).
	leaf extract	(Cho et al., 2002)
Anti-coagulatory/anti-thrombotic activity	ethanolic extract	(Yun et al., 2002).

1.3 민들레속 식물의 식물화학적 연구

1.3.1. Sesquiterpene

민들레에 대한 식물화학적 연구는 이미 많이 진행이 되어있다. 대표적인 화합물 계열로 국화과에서 많이 보고되는 sesquiterpene이 있다. *T. officinale*에서 eudesmanolide 골격의 tetrahydroidentin B (1), taraxacolide acid β -D-glucoside (2), guaianolide 골격의 11 β , 13-dihydrolactucin (3), ixerin D (4), germacranolide esters인 taraxinic acid β -D-glucopyranoside (5), 11, 13-dihydrotaraxinic acid β -glucoside (6), ainslioside (7) 가 분리되었으며 (Hansel et al., 1980, Kisiel and Barszcz, 2000), 그 외 *T. bicornis* Dahlst에서 sonchuside (8), *T. hondoensis* Nak. et Koidz에서 vernoflexuoside (9), *T. linearisquameum*

Soest에서 3β -hydroxy-4 α H-3-dihydrosantamarine- β -D-glucopyranoside (10)

T. platycarpum 에서 deacetylmatricarin (11), taraxafolide (12)와 그

유도체들이 보고되었다 (Michalska and Kisiel, 2001, Kisiel and Michalska,

2005, Zidorn et al., 1999, Michalska and Kisiel, 2005).

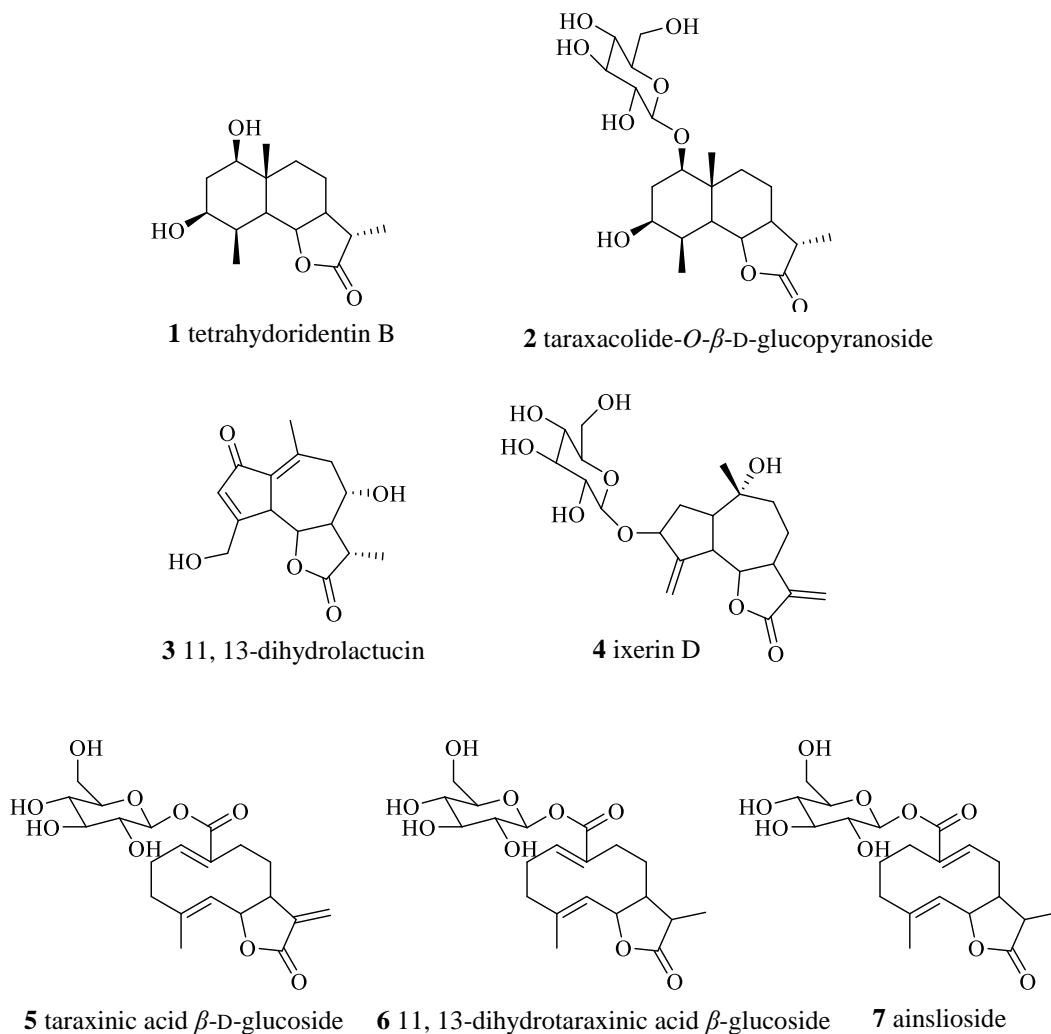


Fig. 1-1. Structure of sesquiterpenes reported in the genus *Taraxacum*.

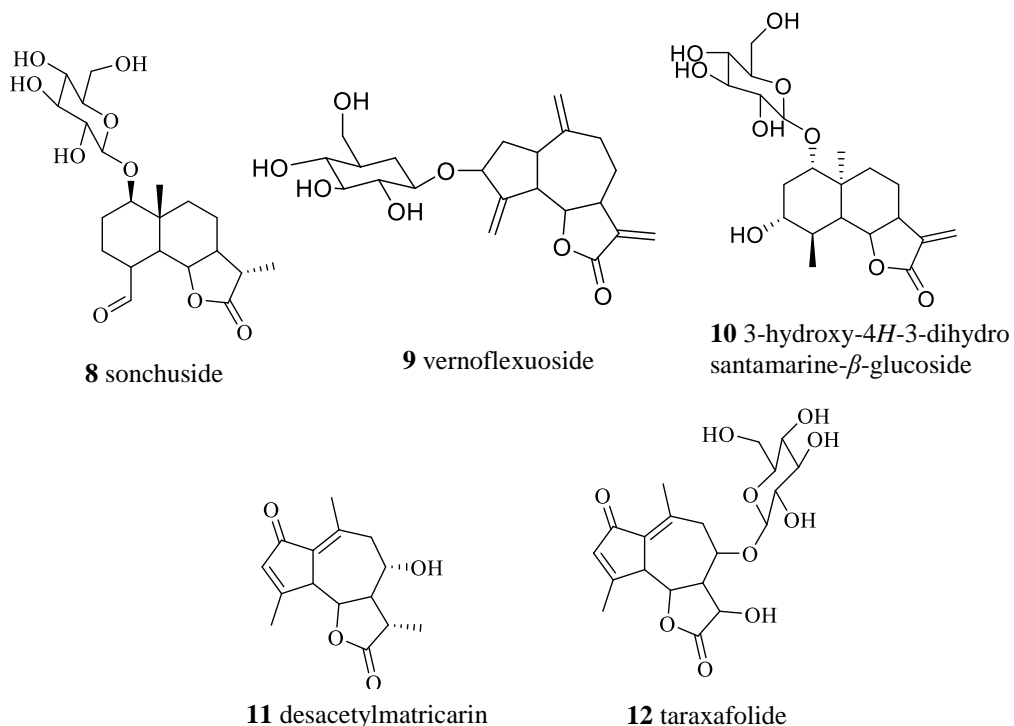


Fig. 1-1. Structure of sesquiterpenes reported in the genus *Taraxacum*.

1.3.2. Triterpene

Triterpene으로는 phytosterol구조가 많이 보고되어 있으며, phytosterol은 섭취 시 염증과 콜레스테롤수치를 낮추는 효과가 있어 비만이나 당뇨 활성의 관련성이 보고되어 있다. *T. officinale*에서 taraxasterol (**13**), arnidiol (**14**), Ψ-taraxasterol (**15**), faradiol (**16**), α- and β-amyrin (**17, 18**), β-sitosterol (**19**), stigmasterol (**20**) 등의 phytosterol이 보고되어 있다 (Hansel et al., 1980, Akashi et al., 2000).

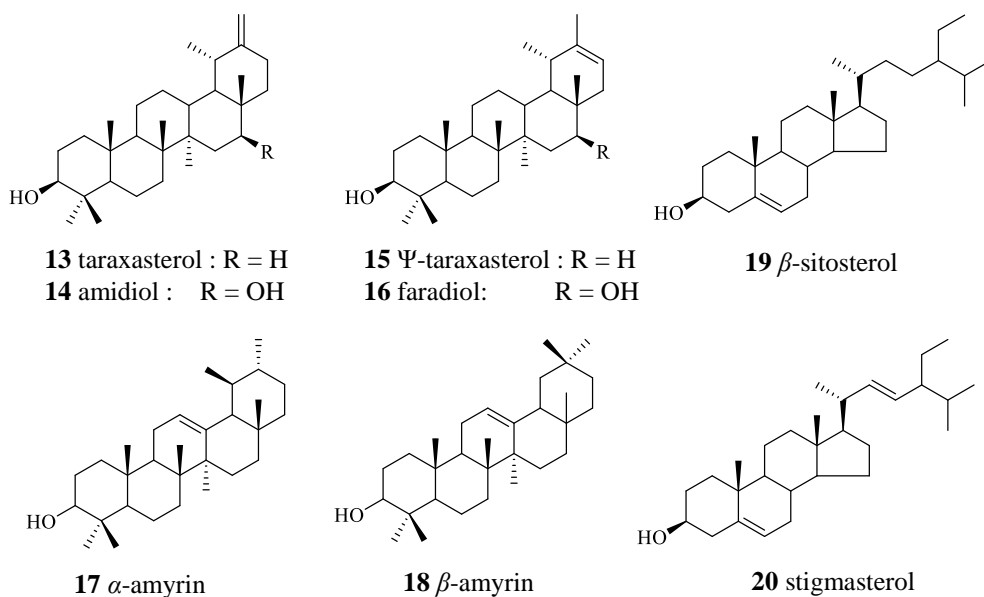


Fig. 1-2. Structure of triterpenes reported in the genus *Taraxacum*.

1.3.3. 페놀성 화합물

민들레에는 플라보노이드, 페놀산 유도체를 포함한 다양한 페놀성 화합물에 대한 보고가 많다. 앞서 서술한 민들레의 활성은 대부분 페놀성 화합물에서 비롯된 항산화, 항염증 활성이라 판단을 할 수 있다 (Wirngo et al., 2016). 분리 보고된 페놀성 화합물로는 chicoric acid (**21**), *p*-coumaric acid (**22**), caffeic acid (**23**), quinic acid (**24**), 4-hydroxyphenylacetic acid (**25**), syringic acid (**26**) 과 coumarin 화합물로 umbelliferone (**27**), esculetin (**28**), scopoletin (**29**), aesculin (**30**), cichoriin (**31**) 등이 있다 (Wolbis et al., 1993, Williams et al., 1996, Kuwajima et al., 1992). Flavonoid 는 luteolin glucoside (**32-35**), quercetin glucoside (**36-40**), apigenin glucoside (**41-43**)등이 보고되어 있다 (Wolbis et al., 1993, Williams et al., 1996).

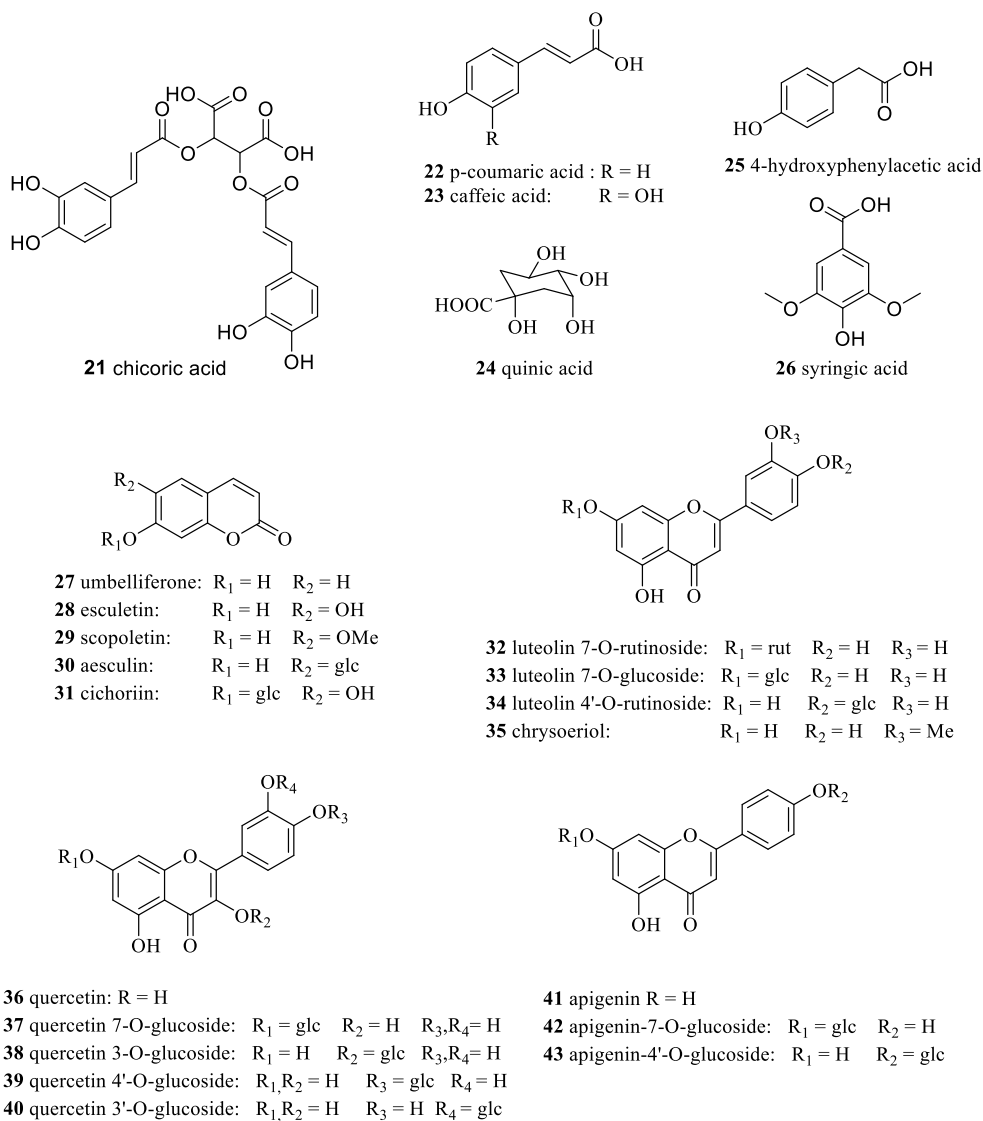


Fig. 2-1. Structure of phenolic derivatives reported in the genus *Taraxacum*.

1.3.4. Inositol

Inositol 화합물은 cyclohexane 구조이며, 한 탄소에 한 개씩의 hydroxyl 기가 치환된 2 차 대사산물이다. 주로 페놀성 functional group 이 hydroxyl 기에 치환되어 있는 형태를 띄며, inositol 은 9 개의 입체이성질체구조가 존재한다 (*myo*-, *epi*-, *scyllo*-, *neo*-, *D/L-chiro*-, *allo*-, *cis*-, *muco*-inositol) (Fig. 3.). 보고된 inositol 로는 1,2,5-tri-*O*-4-hydroxyphenyl acetyl-*chiro*-inositol (**44**), 4,5,6-tri-*O*-4-hydroxyphenylacetyl-*chiro*-inositol (**45**), 1,4-di-*O*-4-hydroxyphenylacetyl-*neo*-inositol (**46**)이 있다 (Kenny et al., 2014, Liu et al., 2014). 하지만 inositol 이성질체의 대한 동정이 명확히 되지 않은 상태이기 때문에 본 연구는 시작 전에 모든 inositol 이성질체에 대해 ^1H NMR 데이터를 정리, 동정하였다 (Table 3).

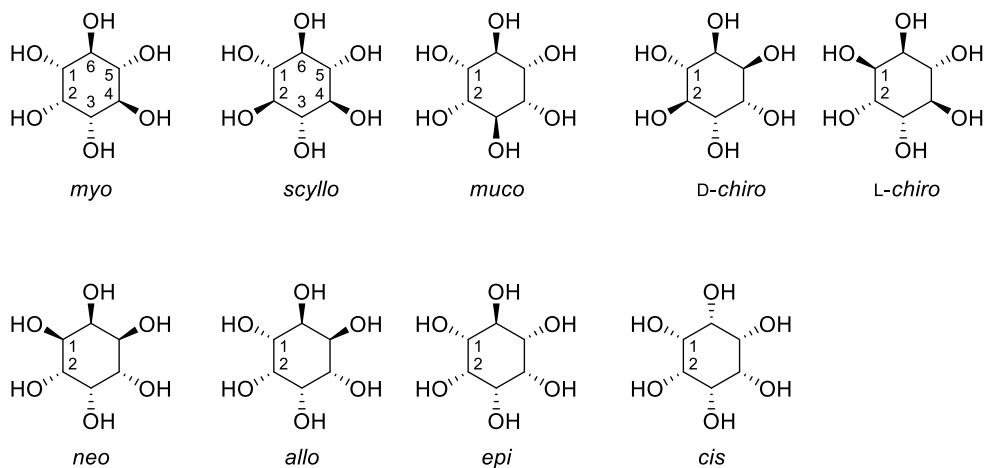


Fig. 3. Structure of basic inositols

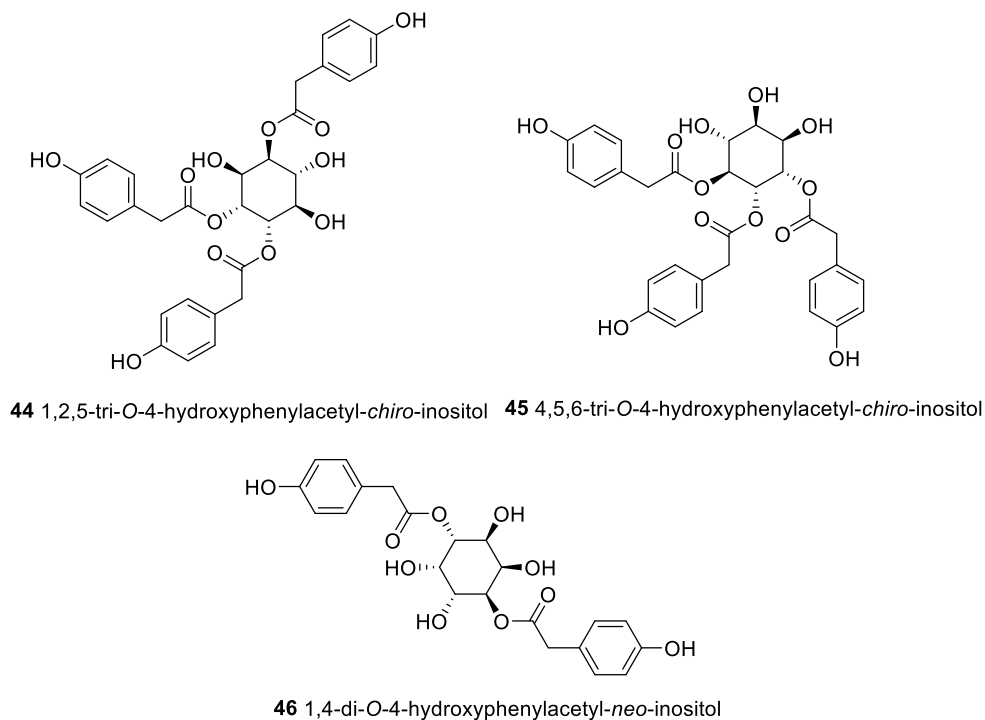


Fig. 2-2. Structure of inositol derivatives reported in the genus *Taraxacum*.

Table 3. ^1H NMR data of inositols

Inositol	^1H NMR	reference	
<i>myo</i> -	D_2O	D_2O	
1,3	3.54 (dd, 10.0, 2.9)	3.55 (dd, 10.0, 2.8)	
2	4.07 (t, 2.9)	4.07 (t, 2.9)	(Vukovic et al., 2015)
4,6	3.63 (t, 9.7)	3.63 (t, 9.8)	(Liu et al., 2014)
5	3.28 (t, 9.4)	3.29 (t, 9.4)	
<i>scyllo</i> -	D_2O	D_2O	
1,2,3,4,5,6	3.35 (s)	3.30 (s)	(Podeschwa et al., 2003)
<i>muco</i> -		D_2O	
1,2,4,5		3.75 (d, 5.9)	(Takahashi et al., 2000)
3,6		3.88 (t, 5.9)	

<i>chiro-</i>		D ₂ O	D ₂ O	
	1,2	4.03 (d, 2.3)	3.97 (br)	(Podeschwa et al., 2003)
	3,6	3.75 (dt, 6.8, 2.5)	3.70 (m)	(Takahashi et al., 2000)
	4,5	3.59 (dd, 7.1, 2.7)	3.53 (m)	
<i>neo-</i>			D ₂ O	
	1,2,4,5		3.64 (br)	(Podeschwa et al., 2003)
	3,6		3.92 (br)	(Takahashi et al., 2000)
<i>allo-</i>		D ₂ O	D ₂ O	
	2,5	3.90 (s)	3.85 (s)	(Podeschwa et al., 2003)
	1,3,4,6	4.04 (m)	3.98 (m)	
<i>epi-</i>		D ₂ O	D ₂ O	
	1,5	3.50 (dd, 9.9, 2.8)	3.35 (d, 9.7)	(Podeschwa et al., 2003)
	2,4	4.08 (t, 2.8)	3.93 (t, 2.6)	(Takahashi et al., 2000)
	3	3.75 (t, 3.0)	3.71 (t, 2.9)	
	6	3.86 (t, 9.9)	3.60 (t, 9.9)	
<i>cis-</i>		D ₂ O	D ₂ O	
	2,5	4.09 (s)	3.73 (s)	(Podeschwa et al., 2003)
	1,3,4,6	3.68 (s)	3.50 (s)	

1.3.5. 기타 화합물

Acylated γ -butyrolactone glycoside 화합물인 taraxacoside (**47**)는 *T. officinale*의 뿌리로부터 분리보고 된 바가 있다 (Rauwald and Huang, 1985). 하지만 butyrolactone 의 입체구조는 명확하게 동정되지 않은 상태이다. 그 외, alkaloid 구조인 taraxacine-A, B (**48**, **49**)는 *T. formosanum*로부터 분리보고 되었다 (Leu et al., 2003).

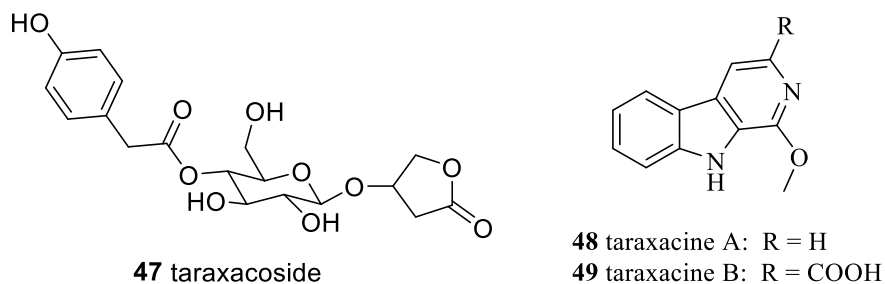


Fig. 2-3. Structure of miscellaneous compounds reported in the genus *Taraxacum*.

2. 연구의 목적

천연물을 이용한 당뇨병 치료제를 개발할 때, 下記의 네 가지 연구 방향이 있다 (Wirngo et al., 2016).

1. 당 재흡수 억제
2. 알파글루코시데이즈를 비롯한 당분해 효소 억제
3. 당 신생억제
4. 칼륨 channel 억제 (인슐린 분비촉진)

혈당강하제에 대한 설명에서 언급한 바와 같이 알파글루코시데이즈 억제제의 부작용은 다른 계열의 약물보다 상대적으로 적다. 따라서, 본 연구는 천연물에서 알파글루코시데이즈 억제활성을 갖는 small molecule 을 찾아 새로운 알파글루코시데이즈 억제제를 개발하기 위한 연구이다. 대표적으로 사용되는 알파글루코시데이즈 억제제 acarbose 는 다당류형태의 구조이며, 다당류와 같이 효소에 경쟁적 결합을 하여 억제활성을 나타낸다. Acarbose 의 부작용인 복통, 설사는 분해되지 않은

다당류가 대장에 유입되어 장내세균의 증식을 유발하기 때문에 발생한다 (Hanefeld, 1998, Satoh et al., 2015). 천연물에서 알파글루코시데이즈 억제 활성을 보이는 화합물들은 다당류형태가 아닌 저분자화합물 형태이기 때문에 acarbose 의 부작용이 개선된 알파글루코시데이즈 억제제의 개발이 가능하다.

Table 4. Chemical constituents from *Taraxacum officinale* related with antidiabetes action

	activity	reference
phytosterol	Antihyperglycemic and anti-inflammatory activity	(Petlevski et al., 2003)
sesquiterpene lactone	Anti-inflammatory, anti- hyperglycemic and antimicrobial activity	(Arpadjan et al., 2008)
flavonoid and flavonoid glycoside	Anti-oxidant activity	(Ceballos-Picot et al., 1996), (Hagymasi et al., 2000)
phenolic acid	Anti-oxidative and immunostimulatory activity	(Boden, 1997), (Kenny et al., 2015)

민들레가 당뇨병 치료에 사용되었다는 기록은 앞서 언급하였다. 이를 근거로 당뇨 활성연구가 보고 되어있다 (Table 4). 포공영에서 분리한 phytosterol, sesquiterpene 들은 혈당을 낮추고, 항염증 활성을 보이며 (Petlevski et al., 2003, Arpadjan et al., 2008), flavonoid 와 phenolic 화합물 역시

항산화 활성 (Hagymasi et al., 2000, Kenny et al., 2015) 으로 당뇨병치료와 관련이 있다고 한다. 하지만 이들은 모두 항산화, 항염 활성을 이용하여 β 세포를 자극하거나 당 신생을 억제하는 방향이지만, 알파글루코시데이즈를 표적하는 하는 연구는 보고되지 않은 상황이다. 따라서, 본 연구는 당뇨활성을 나타냈던 포공영에서 알파글루코시데이즈 효소를 억제하는 후보물질을 찾는 것이며, 이 결과는 새로운 알파글루코시데이즈 억제제 신약을 개발하는데 이바지할 수 있을 것이다.

II. 실험 재료 및 방법

1. 재료

Taraxacum officinale (서양민들레)

서양민들레 *Taraxacum officinale* F.H. Wigg 는 휴먼허브 (경산, 한국)에서 구매하였으며 서울대학교 약학대학 김진웅 교수로부터 감정 받은 후 실험에 사용하였다. 표본 (# CU201508T/O)은 가톨릭대학교에 보관되어 있다.

시약

모든 크로마토그래피에 사용한 유기용매는 분석용이며 대정화금 (경기도, 한국)에서 구매하였다. HPLC등급 acetonitrile 과 methanol 은 한국 JT baker (서울, 한국)에서 구매하였으며, 정제수는 Millipore Milli-Q® 정수시스템을 이용하였다. 크로마토그래피에 사용한 Silica gel 60과 RP-C18 silica gel은 Merck (Kenilworth, NJ, USA); Sephadex LH-20 은 Pharmacia Co. (Stockholm, Sweden); TLC plate에 코팅된 silica gel 및 silica gel RP-18은 Merck (Kenilworth, NJ, USA)에서 제조된 재료를 사용하였다.

장비

Optical rotations: P-2000 digital polarimeter (Jasco, Tokyo, Japan).

NMR: AscendTM 500, 800 spectrometer (Bruker, Germany).

UV spectrometer: UV-1800 spectrometer (Shimadzu, Japan).

HPLC: Agilent 1260 infinity HPLC system (Agilent Technologies, Santa Clara, CA, USA)

Gilson HPLC 805 module equip with 306 pump and 151 UV/Vis detector (Gilson, USA)

MPLC: IOTA S 300 pump (ECOM, UK) equipped with 600 UV–VIS variable wavelength detector (Sapphire technology, Hong Kong)

CombiFlash Rf system (Teledyne Isco, USA)

HPLC 컬럼: Inno C18 column (5 μm , 20.0 mm \times 250 mm, Young Jin Biochrom Co. Ltd., Korea)

HR-ESI-MS: Agilent 6530 ESI-Q-TOF mass spectrometer (Agilent Technologies, Santa Clara, CA, USA)

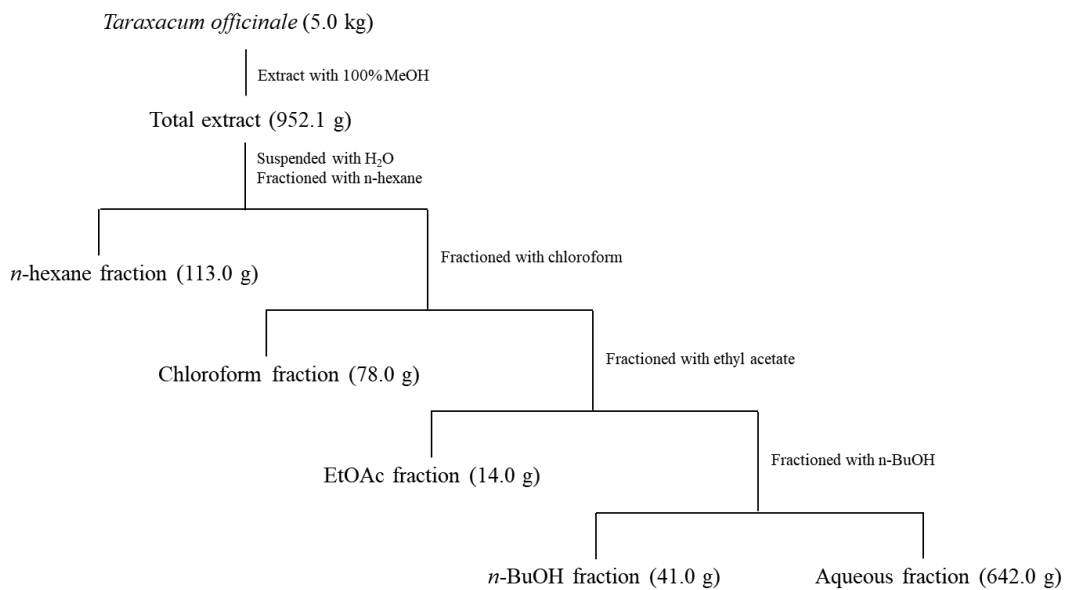
Ultrasonicator: Branson 5210 (UK)

Evaporator: EYELANE (Japan)

2. 방법

2.1 추출 및 분획

서양민들레 전체부위 (5.0 kg)을 100% 메탄올로 초음파추출 3 회 (12 L)하여 951.0 g 의 추출물을 추출하였다. 이를 물에 현탁하여 *n*-hexane, chloroform, ethyl acetate 및 *n*-butanol 순으로 분획을 실시하였고 각각 113.0, 78.0, 14.0, 41.0 g 의 분획물을 확보하였다.

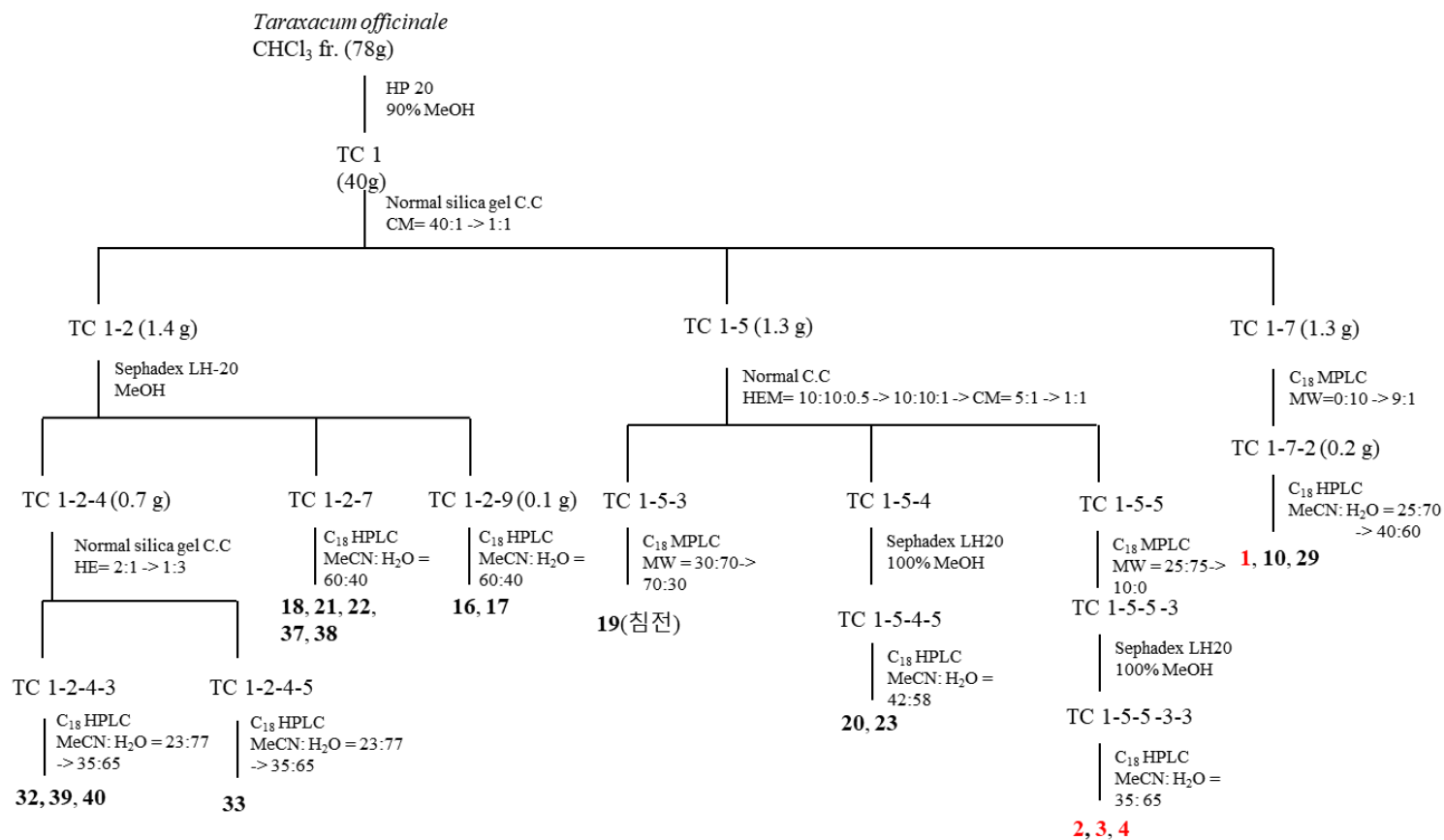


Scheme1. Extraction and fractionation of *T. officinale*

2.2 분리 및 정제

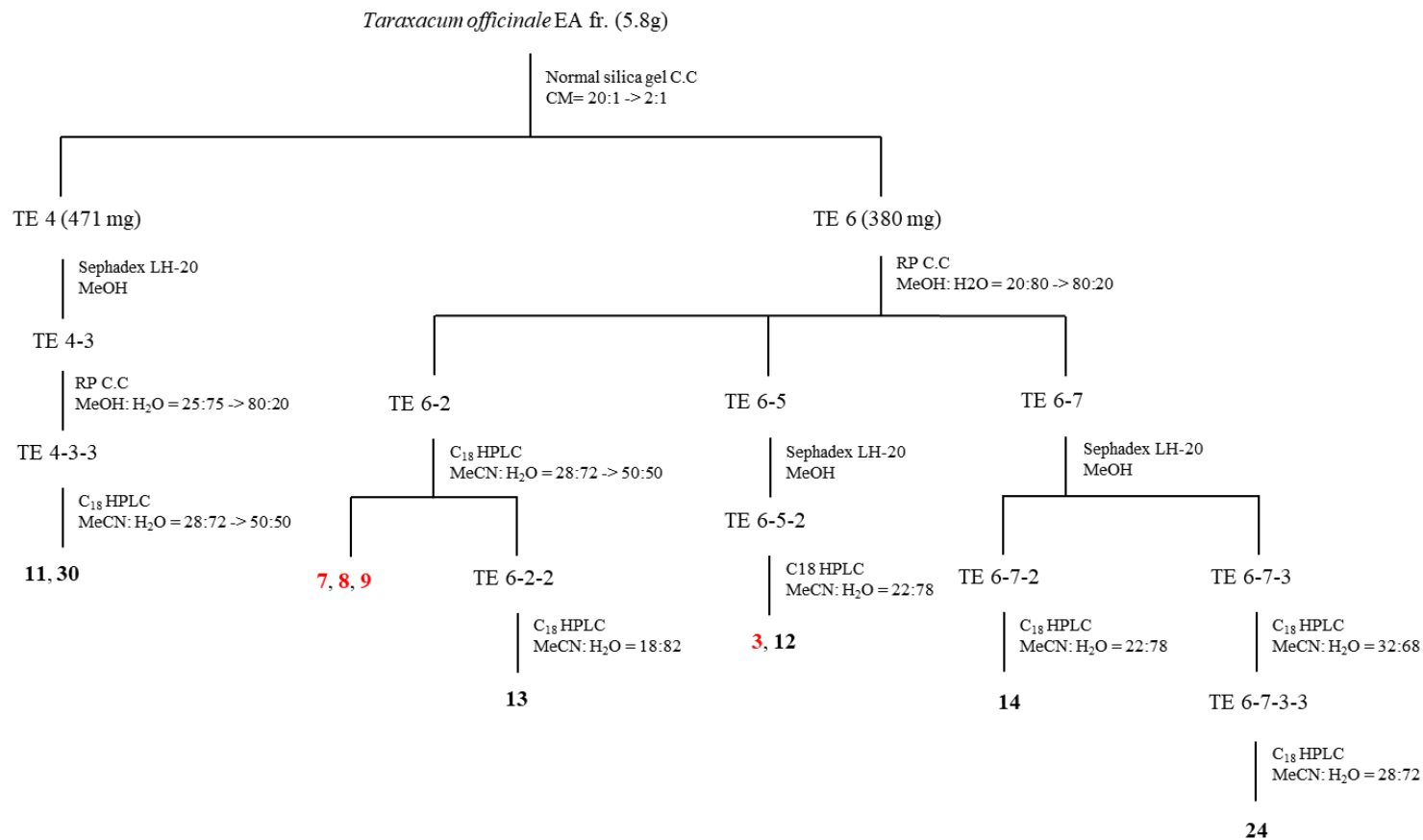
CHCl_3 분획물을 HP-20 (90% MeOH) 컬럼크로마토그래피를 실시하여 2개의 소분획으로 나누었다 (TC1, 2). TC1 소분획에 대해 컬럼크로마토그래피 [CHCl_3 -MeOH (40:1 \rightarrow 1:1)]를 실시하였고, 아홉 개의 소분획으로 분리하였다 (TC1-1~1-9). TC 1-2 소분획을 sephadex LH-20 (100% MeOH)를 통하여 아홉 개의 소분획으로 나누었고 (TC 1-2-1~1-2-9), 이 중 TC 1-2-4를 silica gel 컬럼 크로마토그래피 [hexane-EtOAc (2:1 \rightarrow 1:3)]를 통해 네 개의 소분획으로 나누었다 (TC 1-2-4-1~1-2-4-5). 소분획 TC 1-2-2-3과 TC 1-2-2-5는 HPLC (23–35% aqueous MeCN) 정제를 통해 화합물 **32** (10.0 mg), **33** (2.5 mg), **39** (1.7 mg), **40** (2.0 mg) 분리하였다. 또한 TC 1-2-7에서 HPLC (60% aqueous MeCN) 정제를 통해 화합물 **18** (5.3 mg), **21** (15.0 mg), **22** (3.0 mg), **37** (4.9 mg), **38** (7.3 mg)을 분리정제 하였다. 화합물 **16** (7.0 mg)과 **17** (2.0 mg)은 TC 1-2-4에서 HPLC (60% aqueous MeCN)를 통해 분리하였다. 소분획 TC 1-5을 silica gel 컬럼 크로마토그래피 [hexane-EtOAc-MeOH (10:10:0.5 \rightarrow 10:10:1) \rightarrow CHCl_3 -MeOH solvent system (5:1 \rightarrow 1:1)]를 통해 다섯 개의 소분획으로 나누었다 (TC 1-5-1 ~ 1-5-5). 이 중 TC 1-5-3에서 재결정을 통해 화합물 **19**를 분리하였고, TC 1-5-4을 Sephadex LH-20 (100% MeOH)을 통해 다섯 개의 소분획으로 나누었고, 이 중 TC 1-5-4-5에서 HPLC (42% aqueous MeCN) 정제를 통해 화합물 **20** (11.0 mg)과 **23** (4.0 mg)를 분리하였다. TC 1-5-5에

대해 RP-silica gel과 sephadex LH-20 컬럼크로마토그래피를 실시하였고, 다시 HPLC (35% aqueous MeCN)를 실시하여 화합물 **2** (8.0 mg), **3** (2.0 mg), **4** (2.3 mg)를 분리정제 하였다. 소분획 TC 1-7에 대해 RP-silica gel 컬럼 크로마토그래피 (0-10% aqueous MeOH)을 실시하였고 네 개의 소분획으로 나누었다 (TC 1-7-1 ~ 1-7-4). 화합물 **1** (7.0 mg), **10** (2.0 mg), **29** (2.0 mg)는 소분획 TC 1-7-2를 정제하여 (HPLC, 25% → 40% aqueous MeCN) 분리하였다.



Scheme2. Isolation of compounds from the CHCl₃ soluble extract of *T. officinale*

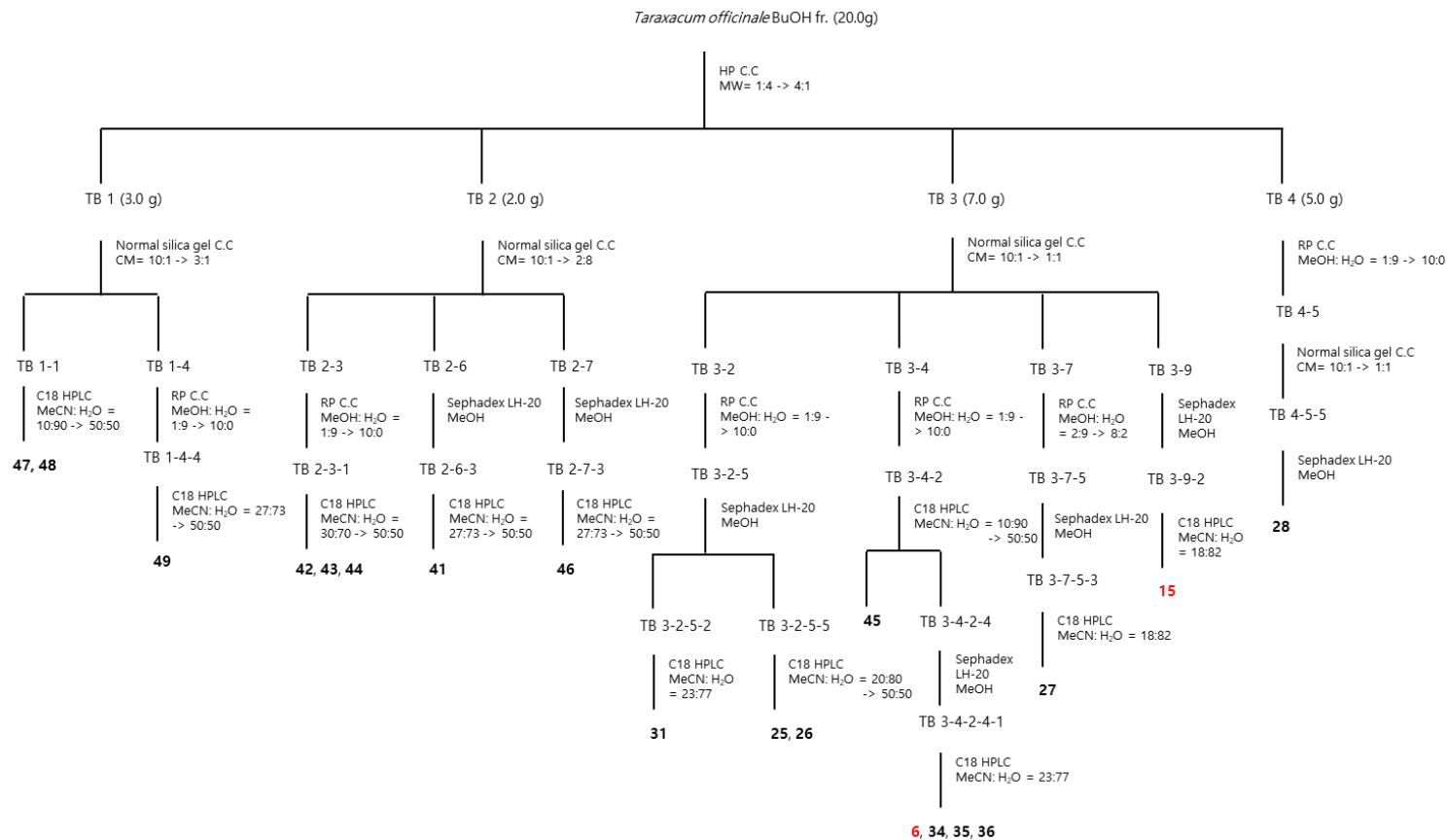
Ethyl acetate 분획물을 silica gel 컬럼크로마토그래피 [CHCl_3 -MeOH (20:1→2:1)]를 통해 일곱 개의 소분획으로 나누었다 (TE 1 ~ 7). 소분획 TE 4를 sephadex LH-20 (100% MeOH)를 통해 여섯 개의 소분획으로 나누었고, 그 중 TE 4-3을 RP 크로마토그래피를 통하여 일곱 개의 소분획으로 나누었으며, TE 4-3-3을 HPLC (28% → 50% MeCN)를 통하여 화합물 **11** (2.0 mg)과 **30** (5.0 mg)을 분리하였다. 소분획 TE 6을 RP 크로마토그래피 (20% → 80% MeOH)를 통해 아홉 개의 소분획으로 나누었다 (TE 6-1 ~ 6-9). TE 6-2를 semiprep C_{18} HPLC (28% → 50% MeCN)을 통해 화합물 **7** (2.0 mg), **8** (10.0 mg), **9** (1.5 mg)와 소분획 TE 6-2-2를 정제하였다. 그리고 TE 6-2-2를 정제하여 (HPLC, 18% MeCN) 화합물 **13** (17.0 mg)을 분리하였다. 소분획 TE 6-5에 대하여 sephadex LH-20 (100% MeOH)과 HPLC (22% MeCN)를 실시하여 화합물 **3** (1.0 mg), **12** (10.0 mg)를 정제하였다. 소분획 TE 6-7에 sephadex LH-20을 실시하여 소분획 네 개로 나누었고 (TE 6-7-1 ~ 6-7-4), TE 6-7-2에 HPLC (22% MeCN)를 실시하여 화합물 **14** (2.0 mg)를 정제하였다. 화합물 **24** (7.0 mg)는 TE 6-7-3에서 반복 HPLC (32 % MeCN, 28% MeCN)를 실시하여 분리 정제하였다.



Scheme3. Isolation of compounds from the EA soluble extract of *T. officinale*

Butanol 분획을 HP-20 컬럼크로마토그래피 [MeOH-H₂O (1:4 → 4:1)]를 통해 다섯 개의 소분획으로 나누었다 (TB 1 ~ 5). 소분획 TB 1 에 대해 silica gel 컬럼크로마토그래피 [CHCl₃-MeOH (10:1→3:1)]를 실시하였고 다섯 개의 소분획으로 나누었다 (TB 1-1 ~ 1-5). 화합물 **47** (1.1 mg)과 **48** (2.0 mg)은 TB 1-1 을 HPLC (10 → 50% MeCN) 정제하여 분리하였다. 소분획 TB 1-4 에 대해 반복적 크로마토그래피 [RP, MeOH-H₂O (1:9 → 10:0) & HPLC, MeCN-H₂O (27:73 → 50:50)]를 실시하여 화합물 **49** (6.0 mg)를 분리하였다. 소분획 TB 2 에 silica gel 컬럼크로마토그래피 [CHCl₃-MeOH (10:1→2:8)]를 실시하여 여덟 개의 소분획으로 나누었다 (TB 2-1 ~ 2-8). 화합물 **42** (3.5 mg), **43** (12.0 mg), **44** (8.0 mg)는 TB 2-3 에 여러 크로마토그래피 [RP, MeOH-H₂O (1:9 → 10:0) & HPLC, MeCN-H₂O (30:70 → 50:50)]를 실시하여 분리하였다. 화합물 **41** (6.0 mg)과 **46** (4.0 mg)은 각각 TB 2-6 과 TB 2-7 분획에서 여러크로마토그래피 [sephadex LH-20, 100% MeOH & HPLC, MeCN-H₂O (27:73 → 50:50)]로 정제분리 하였다. 소분획 TB 3 에 대해 silica gel 크로마토그래피를 실시하여 아홉 개의 분획으로 나누었다 (TB 3-1 ~ 3-9). TB 3-2 를 RP 크로마토그래피 [MeOH-H₂O (1:9 → 10:0)]를 통해 다섯 개의 분획으로 나누었고, 그 중 TB 3-2-5 를 sephadex LH-20 (100% MeOH)를 5 개의 분획으로 또 나누었다 (TB 3-2-5-1 ~ 3-2-5-5). 화합물 **31** (10.0 mg)을 TB 3-2-5-2 에서 HPLC (23% aqueous MeCN)를 통해 정제하였고, TB 3-2-5-5 에서 화합물 **25** (7.0 mg), **26** (2.0 mg)을 분리하였다 [HPLC, MeCN-H₂O (20:80 → 50:50)]. 소분획 TB 3-4 에 RP

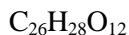
컬럼크로마토그래피를 실시하여 다섯 개의 분획으로 나누었고 (TB 3-4-1 ~ 3-4-5), TB 3-4-2 에서 HPLC [MeCN-H₂O (10:90 → 50:50)]를 통하여 화합물 **45** (4.0 mg) 와 소분획 네 개를 분리하였다 (TB 3-4-2-2 ~ TB 3-4-2-5). 화합물 **6** (21.0 mg), **34** (7.0 mg), **35** (7.0 mg), **36** (5.5 mg)은 TB 3-4-2-4 를 HPLC (23% aqueous MeCN) 정제를 통하여 분리하였다. 화합물 **27** (3.0 mg)은 TB 3-7 에 여러 크로마토그래피 [RP, MeOH-H₂O (2:9 → 8:2) & sephadex LH-20, 100% MeOH & HPLC, MeCN-H₂O (27:73 → 50:50)]을 적용하여 정제하였다. 화합물 **15** (3.0 mg) 는 TB 3-9 를 여러 정제법 [sephadex LH-20, 100% MeOH, HPLC, MeCN-H₂O (27:73 → 50:50)]을 통하여 분리하였다. 소분획 TB 4 에 RP 컬럼크로마토그래피를 적용하여 여섯 개의 소분획으로 나누었고, 그 중 TB 4-5 에 대해 반복적 크로마토그래피 [silica gel column, CHCl₃-MeOH (10:1→3:1) & sephadex LH-20, 100% MeOH]를 사용하여 화합물 **28** (1.2 mg) 을 분리하였다.



Scheme4. Isolation of compounds from the BuOH soluble extract of *T. officinale*

화합물 1

Colorless gum



$[\alpha]_{\text{D}}^{20} +52.4$ (c 0.7, MeOH)

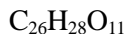
UV (MeOH) λ_{max} 218 (4.06), 278 (3.32) nm

HRESIMS m/z 555.1465 $[\text{M}+\text{Na}]^+$ (calcd. for $\text{C}_{26}\text{H}_{28}\text{O}_{12}\text{Na}$, 555.1478)

^1H NMR (DMSO- d_6 , 500 MHz) ^{13}C NMR (DMSO- d_6 , 125 MHz): see table 5 and 6.

화합물 2

Colorless gum



$[\alpha]_{\text{D}}^{20} +49.8$ (c 0.23, MeOH)

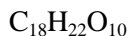
UV (MeOH) λ_{max} 219 (3.98), 268 (3.53) nm

HRESIMS m/z 561.1602 $[\text{M}+\text{HCOO}]^-$ (calcd. for $\text{C}_{26}\text{H}_{27}\text{O}_{11}$, 561.1608)

^1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 5 and 6.

화합물 3

Colorless gum



$[\alpha]_{\text{D}}^{20} +25.3$ (c 1.0, MeOH)

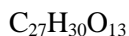
UV (MeOH) λ_{max} 222 (3.86), 274 (3.13)

HRESIMS m/z 421.1125 $[\text{M}+\text{Na}]^+$ (calcd. for $\text{C}_{18}\text{H}_{22}\text{O}_{10}\text{Na}$, 421.1111)

^1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 5 and 6.

화합물 4

Colorless gum



$[\alpha]_{\text{D}}^{20} +26.2$ (c 0.2, MeOH)

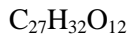
UV (MeOH) λ_{max} 219 (4.05), 267 (3.50) nm

HRESIMS m/z 561.1598 $[\text{M}-\text{H}]^-$ (calcd. for $\text{C}_{27}\text{H}_{29}\text{O}_{13}$, 561.1608)

^1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 5 and 6.

화합물 5

Colorless gum



$[\alpha]_{\text{D}}^{20} +33.8$ (c 0.8, MeOH)

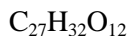
UV (MeOH) λ_{max} 218 (3.99), 265 (3.32) nm

HRESIMS m/z 593.1863 $[\text{M}+\text{HCOO}]^-$ (calcd. for $\text{C}_{28}\text{H}_{33}\text{O}_{14}$, 593.1870)

^1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 5 and 6.

화합물 6

Colorless gum



$[\alpha]_{\text{D}}^{20} +32.0$ (c 0.5, MeOH)

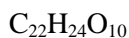
UV (MeOH) λ_{max} 221 (4.06), 275 (3.21) nm

HRESIMS m/z 453.1392 $[\text{M}+\text{Na}]^+$ (calcd. for $\text{C}_{27}\text{H}_{32}\text{O}_{12}\text{Na}$, 453.1373)

^1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 5 and 6.

화합물 7

Colorless gum



$[\alpha]_{\text{D}}^{20} +23.3$ (c 0.6, MeOH)

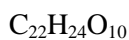
UV (MeOH) λ_{max} 224 (4.05), 274 (3.29) nm

HRESIMS m/z 471.1281 $[\text{M}+\text{Na}]^+$ (calcd. for $\text{C}_{22}\text{H}_{24}\text{O}_{10}\text{Na}$, 471.1267)

^1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 7 and 8.

화합물 8

Colorless gum



$[\alpha]_{\text{D}}^{20} +24.2$ (c 0.5, MeOH)

UV (MeOH) λ_{\max} 221 (4.02), 273 (3.18) nm

HRESIMS m/z 471.1281 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{22}H_{24}O_{10}Na$, 471.1267)

1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 7 and 8.

화합물 9

Colorless gum

$C_{30}H_{30}O_{12}$

$[\alpha]_D^{20} +38.7$ (c 0.4, MeOH)

UV (MeOH) λ_{\max} 222 (3.80), 274 (3.02) nm

HRESIMS m/z 605.1664 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{30}H_{30}O_{12}Na$, 605.1635)

1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 7 and 8.

화합물 10

Colorless gum

$C_{30}H_{30}O_{12}$

$[\alpha]_D^{20} +26.7$ (c 0.5, MeOH)

UV (MeCN: H₂O): λ_{\max} 222 (3.99) , 275 (3.21) nm

HRESIMS m/z 581.1672 $[M-H]^-$ (calcd. for $C_{30}H_{29}O_{12}$, 581.1659)

1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 7 and 8.

화합물 11

Colorless gum

$C_{30}H_{30}O_{12}$

$[\alpha]_D^{20} +24.4$ (c 0.6, MeOH)

UV (MeOH) λ_{\max} 224 (3.91), 277 (3.11) nm

HRESIMS m/z 605.1658 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{30}H_{30}O_{12}Na$, 605.1635)

1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 7 and 8.

화합물 12

Colorless gum

$C_{22}H_{24}O_{10}$

$[\alpha]_D^{20}$ -30.9 (*c* 0.6, MeOH)

UV (MeOH) λ_{max} 222 (3.88), 277 (3.10) nm

HRESIMS m/z 471.1285 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{22}H_{24}O_{10}Na$, 471.1267)

1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 7 and 8.

화합물 13

Colorless gum

$C_{22}H_{24}O_{10}$

$[\alpha]_D^{20}$ -29.6 (*c* 2.0, MeOH)

UV (MeOH) λ_{max} 222 (3.94), 275 (3.17) nm

HRESIMS m/z 471.1288 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{22}H_{24}O_{10}Na$, 471.1267)

1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 7 and 8.

화합물 14

Colorless gum

$C_{22}H_{24}O_{10}$

$[\alpha]_D^{20}$ +38.8 (*c* 0.6, MeOH)

UV (MeOH) λ_{max} 222 (3.99), 276 (3.16) nm

HRESIMS m/z 471.1288 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{22}H_{24}O_{10}Na$, 471.1267)

1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 7 and 8

화합물 15

Yellow amorphous powder

$C_{27}H_{33}NO_{12}$

$[\alpha]_D^{20}$ +57.6 (*c* 0.3, MeOH)

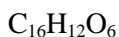
UV (MeOH) λ_{max} 221 (3.92), 279 (3.11) nm

HRESIMS m/z 564.2091 $[M+H]^+$ (calcd. for $C_{27}H_{34}NO_{12}$, 564.2081)

1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 11 and 12.

화합물 16

Yellow amorphous powder



$[\alpha]_{\text{D}}^{20}$ -44.2 (*c* 1.0, MeOH)

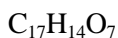
UV (MeOH) λ_{max} 286 (3.95), 328 (4.01) nm

HRESIMS m/z 299.0567 $[\text{M}-\text{H}]^-$ (calcd. for $\text{C}_{16}\text{H}_{11}\text{O}_6$, 299.0556)

^1H NMR (DMSO- d_6 , 500 MHz) ^{13}C NMR (DMSO- d_6 , 125 MHz): see table 9 and 10.

화합물 17

Yellow amorphous powder



$[\alpha]_{\text{D}}^{20}$ -34.4 (*c* 1.0, MeOH)

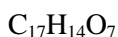
UV (MeOH) λ_{max} 271 (4.05), 329 (4.12) nm

HRESIMS m/z 329.0677 $[\text{M}-\text{H}]^-$ (calcd. for $\text{C}_{17}\text{H}_{13}\text{O}_7$, 329.0661)

^1H NMR (DMSO- d_6 , 500 MHz) ^{13}C NMR (DMSO- d_6 , 125 MHz): see table 9 and 10.

화합물 18

Yellow amorphous powder



$[\alpha]_{\text{D}}^{20}$ -54.4 (*c* 1.0, MeOH)

UV (MeOH) λ_{max} 270 (3.85), 350 (4.06) nm

HRESIMS m/z 353.0635 $[\text{M}+\text{Na}]^+$ (calcd. for $\text{C}_{17}\text{H}_{14}\text{O}_7\text{Na}$, 353.0637)

^1H NMR (DMSO- d_6 , 500 MHz) ^{13}C NMR (DMSO- d_6 , 125 MHz): see table 9 and 10.

화합물 19

Yellow amorphous powder

$C_{15}H_{10}O_6$

$[\alpha]_D^{20}$ -38.1 (*c* 1.0, MeOH)

UV (MeOH) λ_{max} 268 (3.83), 344 (4.01) nm

HRESIMS m/z 285.0411 $[M-H]^-$ (calcd. for $C_{15}H_9O_6$, 285.0399)

1H NMR (DMSO- d_6 , 500 MHz) ^{13}C NMR (DMSO- d_6 , 125 MHz): see table 9 and 10.

화합물 20

Yellow amorphous powder

$C_{26}H_{24}O_{10}$

$[\alpha]_D^{20}$ -58.2 (*c* 0.5, MeOH)

UV (MeOH) λ_{max} 271 (4.03), 333 (4.12) nm

HRESIMS m/z 497.1465 $[M-H]^-$ (calcd. for $C_{26}H_{23}O_{10}$, 497.1448)

1H NMR (DMSO- d_6 , 500 MHz) ^{13}C NMR (DMSO- d_6 , 125 MHz): see table 11 and 12.

화합물 21

Yellow amorphous powder

$C_{28}H_{28}O_{11}$

$[\alpha]_D^{20}$ -17.8 (*c* 1.0, MeOH)

UV (MeOH) λ_{max} 272 (3.92), 340 (4.07) nm

HRESIMS m/z 563.1520 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{28}H_{28}O_{11}Na$, 563.1529)

1H NMR (DMSO- d_6 , 500 MHz) ^{13}C NMR (DMSO- d_6 , 125 MHz): see table 11 and 12

화합물 22

Yellow amorphous powder

$C_{28}H_{28}O_{11}$

$[\alpha]_D^{20}$ -11.8 (*c* 1.0, MeOH)

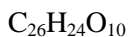
UV (MeOH) λ_{max} 272 (3.97), 338 (4.02) nm

HRESIMS m/z 563.1519 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{28}H_{28}O_{11}Na$, 563.1529)

^1H NMR (DMSO- d_6 , 500 MHz) ^{13}C NMR (DMSO- d_6 , 125 MHz): see table 11 and 12

화합물 23

Yellow amorphous powder



$[\alpha]_{\text{D}}^{20} +26.4$ (c 0.5, MeOH)

UV (MeOH) λ_{max} 271 (4.05), 329 (4.13) nm

HRESIMS m/z 497.1465 $[\text{M}-\text{H}]^-$ (calcd. for $\text{C}_{26}\text{H}_{23}\text{O}_{10}$, 497.1448)

^1H NMR (DMSO- d_6 , 500 MHz) ^{13}C NMR (DMSO- d_6 , 125 MHz): see table 11 and 12.

화합물 24

Yellow amorphous powder



$[\alpha]_{\text{D}}^{20} +34.4$ (c 0.5, MeOH)

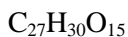
UV (MeOH) λ_{max} 222 (3.92), 276 (3.11) nm

HRESIMS m/z 459.1281 $[\text{M}+\text{Na}]^+$ (calcd. for $\text{C}_{21}\text{H}_{24}\text{O}_{10}\text{Na}$, 459.1267)

^1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 11 and 12.

화합물 25

Yellow amorphous powder



$[\alpha]_{\text{D}}^{20} -33.1$ (c 0.01, MeOH)

UV (MeOH) λ_{max} 254 (4.36), 346 (3.91) nm

HRESIMS m/z 595.1682 $[\text{M}+\text{Na}]^+$ (calcd. for $\text{C}_{27}\text{H}_{30}\text{O}_{15}\text{Na}$, 595.1663)

^1H NMR (DMSO- d_6 , 500 MHz) ^{13}C NMR (DMSO- d_6 , 125 MHz): see table 13 and 14.

화합물 26

Yellow amorphous powder

$C_{27}H_{30}O_{16}$

$[\alpha]_D^{20}$ -15.2 (*c* 0.01, MeOH)

UV (MeOH) λ_{max} 254 (4.12), 355 (4.06) nm

HRESIMS m/z 611.1627 $[M+H]^+$ (calcd. for $C_{27}H_{31}O_{16}$, 611.1612)

1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 13 and 14.

화합물 27

Yellow amorphous powder

$C_{27}H_{30}O_{16}$

$[\alpha]_D^{20}$ -18.2 (*c* 0.01, MeOH)

UV (MeOH) λ_{max} 254 (4.12), 355 (4.06) nm

HRESIMS m/z 611.1630 $[M+H]^+$ (calcd. for $C_{27}H_{31}O_{16}$, 611.1612)

1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 13 and 14.

화합물 28

Yellow amorphous powder

$C_{27}H_{30}O_{16}$

$[\alpha]_D^{20}$ -12.2 (*c* 0.01, MeOH)

UV (MeOH) λ_{max} 254 (4.12), 355 (4.06) nm

HRESIMS m/z 449.1087 $[M + H]^+$ (calcd. $C_{21}H_{21}O_{11}$, 449.1084)

1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 13 and 14.

화합물 29

Brown amorphous powder

$C_{21}H_{30}O_9$

$[\alpha]_D^{20}$ -25.8 (*c* 0.5, MeOH)

UV (MeOH) λ_{max} 243 (4.16), 260 (3.86) nm

HRESIMS m/z 449.1767 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{21}H_{30}O_9Na$, 449.1788)

1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 15 and 16.

화합물 30

Brown amorphous powder

$C_{21}H_{28}O_9$

$[\alpha]_D^{20}$ -31.2 (c 0.5, MeOH)

UV (MeOH) λ_{max} 243 (3.96), 260 (3.12) nm

HRESIMS m/z 447.1641 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{21}H_{28}O_9Na$, 447.1631)

1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 15 and 16.

화합물 31

Brown amorphous powder

$C_{21}H_{32}O_9$

$[\alpha]_D^{20}$ -13.2 (c 0.5, MeOH)

UV (MeOH) λ_{max} 214 (3.79) nm

HRESIMS m/z 451.1962 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{21}H_{32}O_9Na$, 451.1944)

1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 15 and 16.

화합물 32

Colorless gum

$C_{13}H_{20}O_3$

$[\alpha]_D^{20}$ -50.1 (c 0.5, MeOH)

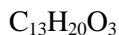
UV (MeOH) λ_{max} 243 (3.86) nm

HRESIMS m/z 225.1486 $[M-H]^+$ (calcd. for $C_{13}H_{21}O_3$ 225.1491)

1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 15 and 16.

화합물 33

Colorless gum



$[\alpha]_{\text{D}}^{20}$ -55.9 (*c* 0.1, MeOH)

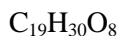
UV (MeOH) λ_{max} 233 (3.96) nm

HRESIMS m/z 225.1491 $[\text{M}+\text{H}]^+$ (calcd. for $\text{C}_{13}\text{H}_{21}\text{O}_3$, 225.1491)

^1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 15 and 16.

화합물 34

Colorless gum



$[\alpha]_{\text{D}}^{20}$ -38.1 (*c* 0.25, MeOH)

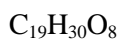
UV (MeOH) λ_{max} 221 (4.00), 279 (3.91) nm

HRESIMS m/z 409.1852 $[\text{M}+\text{Na}]^+$ (calcd. for $\text{C}_{19}\text{H}_{30}\text{O}_8\text{Na}$, 409.1838)

^1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 15 and 16.

화합물 35

Colorless gum



$[\alpha]_{\text{D}}^{20}$ +68.8 (*c* 1.0, MeOH)

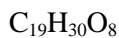
UV (MeOH) λ_{max} 237 (3.94) nm

HRESIMS m/z 409.1858 $[\text{M}+\text{Na}]^+$ (calcd. for $\text{C}_{19}\text{H}_{30}\text{O}_8\text{Na}$, 409.1838)

^1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 15 and 16.

화합물 36

Colorless gum



$[\alpha]_{\text{D}}^{20}$ +71.8 (*c* 1.0, MeOH)

UV (MeOH) λ_{\max} 237 (3.96) nm

HRESIMS m/z 409.1851 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{19}H_{30}O_8Na$, 409.1838)

1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 15 and 16

화합물 37

Colorless gum

$C_{10}H_{10}O_4$

$[\alpha]_D^{20}$ +24.1 (c 0.5, MeOH)

UV (MeOH) λ_{\max} 256 (3.89), 354 (4.01) nm

HRESIMS m/z 195.0650 $[M+H]^+$ (calcd. for $C_{10}H_{11}O_4$, 195.0657)

1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 17 and 18.

화합물 38

Brown amorphous powder

$C_{10}H_9NO_2$

$[\alpha]_D^{20}$ -28.1 (c 0.02, MeOH)

UV (MeOH) λ_{\max} 240 (3.93), 294 (3.73) nm

HRESIMS m/z 198.0522 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{10}H_9NO_2Na$, 198.0531)

1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 19 and 20.

화합물 39

Brown amorphous powder

$C_{11}H_{16}O_3$

$[\alpha]_D^{20}$ -31.6 (c 0.01, MeOH)

UV (MeOH) λ_{\max} 218 (4.07) nm

HRESIMS m/z 241.1082 $[M+HCOO]^-$ (calcd. for $C_{12}H_{17}O_5$, 241.1076)

1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 17 and 18.

화합물 40

Brown amorphous powder



$[\alpha]_{\text{D}}^{20} +56.6$ (c 0.01, MeOH)

UV (MeOH) λ_{max} 211 (4.24) nm

HRESIMS m/z 195.1028 $[\text{M}-\text{H}]^-$ (calcd. for $\text{C}_{11}\text{H}_{15}\text{O}_3$, 195.1021)

^1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 17 and 18.

화합물 41

Yellow amorphous powder



$[\alpha]_{\text{D}}^{20} -28.1$ (c 0.1, MeOH)

UV (MeOH) λ_{max} 257 (4.21), 335 (3.68) nm

HRESIMS m/z 123.0557 $[\text{M}+\text{H}]^+$ (calcd. for $\text{C}_6\text{H}_7\text{N}_2\text{O}$, 123.0558)

^1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 17 and 18.

화합물 42

White amorphous crystal



$[\alpha]_{\text{D}}^{20} -48.4$ (c 1.0, MeOH)

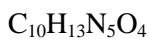
UV (MeOH) λ_{max} 255 (3.27) nm

HRESIMS m/z 268.1052 $[\text{M}+\text{H}]^+$ (calcd. for $\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_5\text{O}_4$, 268.1046)

^1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 19 and 20.

화합물 43

Colorless gum



$[\alpha]_D^{20}$ -78.9 (*c* 0.5, MeOH)

UV (MeOH) λ_{\max} 255 (4.07), 290 (3.97), 345 (4.08) nm

HRESIMS m/z 341.0876 $[M+H]^+$ (calcd. for $C_{15}H_{17}O_9$, 341.0873)

1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 17 and 18.

화합물 44

Colorless gum

$C_{15}H_{16}O_9$

$[\alpha]_D^{20}$ -14.9 (*c* 0.5, MeOH)

UV (MeOH) λ_{\max} 225 (3.97), 264 (3.08) nm

HRESIMS m/z 395.1330 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{17}H_{24}O_9Na$, 395.1318)

1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 17 and 18.

화합물 45

Colorless gum

$C_{17}H_{24}O_9$

$[\alpha]_D^{20}$ -34.9 (*c* 0.5, MeOH)

UV (MeOH) λ_{\max} 274 (3.82) nm

HRESIMS m/z 397.1475 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{17}H_{26}O_9Na$, 397.1475)

1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 17 and 18.

화합물 46

Yellow gum

$C_{12}H_{12}N_2O_2$

$[\alpha]_D^{20}$ -43.2 (*c* 0.25, MeOH)

UV (MeOH) λ_{\max} 274 (3.76), 293 (3.47) nm

HRESIMS m/z 217.0975 $[M+H]^+$ (calcd. for $C_{12}H_{13}N_2O_2$, 217.0977)

1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 17 and

18.

화합물 47

Brown amorphous powder



$[\alpha]_{\text{D}}^{20} +5.6$ (c 1.0, MeOH)

UV (MeOH) λ_{max} 218 (4.02), 263 (3.22) nm

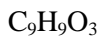
HRESIMS m/z 144.0664 $[\text{M}+\text{H}]^+$ (calcd. for $\text{C}_6\text{H}_{10}\text{NO}_3$, 144.0661)

^1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 19 and

20.

화합물 48

Brown amorphous powder



$[\alpha]_{\text{D}}^{20} -9.1$ (c 1.0, MeOH)

UV (MeOH) λ_{max} 281 (3.81) nm

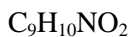
HRESIMS m/z 127.3090 $[\text{M}+\text{H}]^+$ (calcd. for $\text{C}_9\text{H}_{10}\text{O}_3$, 127.3095)

^1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 19 and

20.

화합물 49

Brown amorphous powder



$[\alpha]_{\text{D}}^{20} -35.0$ (c 0.1, MeOH)

UV (MeOH) λ_{max} 251 (3.32) nm

HRESIMS m/z 166.0860 $[\text{M}+\text{H}]^+$ (calcd. for $\text{C}_9\text{H}_{11}\text{NO}_2$, 166.0868)

^1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 19 and

20.

Table 5. ¹H NMR (500 MHz) data of butyrolactone and butanoate derivatives

position	1 ^a	2 ^b	3 ^b	position	4 ^b	5 ^b	6 ^b
3	2.80 (1H, dd, 17.8, 5.9), 2.18 (1H, d, 17.7)	2.68 (1H, dd, 18.0, 6.2) 2.17 (1H, d, 18.0)	2.65 (1H, dd, 18.0, 6.) 2.13 (1H, d, 18.0)	2	2.60 (1H, dd, 16.6, 4.6) 2.55 (1H, dd, 16.6, 8.1)	2.50 (1H, dd, 16.2, 4.8) 2.36 (1H, dd, 16.2, 8.3)	2.48 (1H, dd, 16.3, 5.0) 2.32 (1H, dd, 16.2, 8.1)
4	4.53 (1H, t, 6.1)	4.53 (2H, t, 6.1)	4.50 (2H, t, 6.0)	3	4.16 (1H, dd, 8.1, 4.6)	4.07 (1H, dd, 8.3, 4.8)	4.04 (1H, dd, 8.1, 4.8)
5	4.36 (1H, dd, 10.4, 4.3) 4.33 (1H, t, 9.6)	4.41 (1H, t, 9.4) 4.37 (1H, dd, 10.4, 4.3)	4.41 (1H, t, 10.0) 4.37 (1H, dd, 10.4, 4.2)	4	3.65 (2H, d, 4.8)	3.58 (2H, d, 4.8)	3.57 (2H, d, 4.8)
				OMe	3.42 (3H, s)	3.67 (3H, s)	3.67 (3H, s)
1'	4.75 (1H, d, 8.1)	4.64 (1H, d, 8.0)	4.52 (1H, d, 8.2)	1'	4.87 (1H, d, 8.0)	4.69 (1H, d, 8.0)	4.57 (1H, d, 8.0)
2'	4.61 (1H, dd, 9.8, 8.1)	4.77 (1H, dd, 9.8, 8.1)	4.69 (1H, t, 8.6)	2'	5.02 (1H, dd, 9.8, 8.0)	4.75 (1H, dd, 9.7, 8.0)	4.68 (1H, t, 9.0)
3'	4.99 (1H, t, 9.6)	5.11 (1H, t, 9.5)	3.54 (1H, t, 9.2)	3'	5.24 (1H, dd, 9.4, 9.6)	5.09 (1H, t, 9.5)	3.52 (1H, t, 9.0)
4'	3.40 (1H, m)	3.57 (1H, m)	4.35 (1H, t, 9.2)	4'	3.66 (1H, m)	3.56 (1H, m)	3.37 (1H, t, 9.0)
5'	3.37 (1H, m)	3.41 (1H, ddd, 9.8, 5.5, 2.2)	3.31 (1H, m)	5'	4.16 (1H, dd, 8.1, 4.8)	3.42 (1H, m)	4.16 (1H, m)
6'	3.68 (1H, dd, 11.1, 5.4) 3.49 (1H, m)	3.86 (1H, dd, 12.1, 2.2) 3.69 (1H, dd, 12.1, 5.5)	3.87 (1H, d, 12.1) 3.67 (1H, dd, 12.1, 5.4)	6'	3.90 (1H, dd, 12.0, 2.2) 3.74 (1H, dd, 12.1, 5.2)	3.83 (1H, dd, 12.0, 2.3) 3.70 (1H, dd, 11.0, 4.1)	3.87 (1H, d, 12.0) 3.68 (1H, m)
2''	6.98 (2H, d, 8.5)	6.97 (2H, d, 8.6)	7.11 (2H, d, 8.2)	2''	7.77 (2H, d, 8.8)	6.99 (2H, d, 8.8)	7.12 (2H, d, 8.3)
3''	6.69 (2H, d, 8.5)	6.72 (2H, d, 8.6)	6.75 (2H, d, 8.2)	3''	6.85 (2H, d, 8.8)	6.70 (2H, d, 8.8)	6.72 (2H, d, 8.3)
5''	6.69 (2H, d, 8.5)	6.72 (2H, d, 8.6)	6.75 (2H, d, 8.2)	5''	6.85 (2H, d, 8.8)	6.70 (2H, d, 8.8)	6.72 (2H, d, 8.3)
6''	6.98 (2H, d, 8.5)	6.97 (2H, d, 8.6)	7.11 (2H, d, 8.2)	6''	7.77 (2H, d, 8.8)	6.99 (2H, d, 8.8)	7.12 (2H, d, 8.3)
7''	3.38 (2H, m)	3.55 (2H, d, 15.5)	3.57 (2H, d, 9.7)	7''		3.59 (1H, d, 4.9) 3.32 (1H, m)	3.60 (2H, s)
2'''	6.91 (2H, d, 8.5)	7.22 (2H, d, 6.8)		2'''	7.24 (2H, m)	7.18 (2H, d, 8.3)	
3'''	6.68 (2H, d, 8.5)	7.30 (2H, t, 7.1)		3'''	7.22 (2H, m)	7.28 (2H, t, 6.3)	
4'''		7.26 (1H, d, 7.2)		4'''	7.17 (1H, t, 7.6)	7.24 (1H, d, 7.2)	
5'''	6.68 (2H, d, 8.5)	7.30 (2H, t, 7.1)		5'''	7.22 (2H, m)	7.28 (2H, t, 6.3)	
6'''	6.91 (2H, d, 8.5)	7.22 (2H, d, 6.8)		6'''	7.24 (2H, m')	7.18 (2H, d, 8.3)	
7'''	3.26 (2H, m)	3.25 (2H, d, 5.1)		7'''	3.71 (2H, s)	3.52 (1H, d, 14.8) 3.43 (1H, m)	

^a data were measured in DMSO-*d*₄^b data were measured in MeOH-*d*₄.

Table 6. ^{13}C NMR (125 MHz) data of butyrolactone and butanoate derivatives

position	1 ^a	2 ^b	3 ^b	position	4 ^b	5 ^b	6 ^b
1				1	173.2	173.2	173.3
2	175.5	178.1	178.2	2	37.6	37.7	37.7
3	34.9	36.1	36.1	3	79.1	79.7	79.5
4	74.8	76.6	76.5	4	65.4	65.2	65.2
5	73.7	75.8	75.9	OMe	52.2	52.3	52.4
1'	98.7	101.2	101.6	1'	101.7	102.1	102.4
2'	71.2	73.1	75.2	2'	74.5	73.3	75.5
3'	74.9	76.8	76.0	3'	76.7	77.0	76.1
4'	67.6	69.5	71.5	4'	69.8	69.6	71.6
5'	76.6	78.1	78.3	5'	78.0	77.8	78.0
6'	60.2	62.2	62.6	6'	62.1	62.2	62.5
1''	123.8	126.0	126.4	1''	125.1	126.0	126.4
2''	130.1	131.6	131.6	2''	134.1	131.7	131.7
3''	115.0	116.5	116.4	3''	117.1	116.4	116.3
4''	156.2	157.8	157.7	4''	166.1	157.8	157.6
5''	115.0	116.5	116.4	5''	117.1	116.4	116.3
6''	130.1	131.6	131.6	6''	134.1	131.7	131.7
7''	39.1	41.1	41.4	7''	185.4	41.0	41.1
8''	170.1	172.4	173.1	8''	164.7	172.7	173.3
1'''	124.2	135.5		1'''	135.2	135.4	
2'''	130.2	130.6		2'''	130.7	130.6	
3'''	115.3	129.7		3'''	129.6	129.6	
4'''	156.1	128.2		4'''	128.1	128.1	
5'''	115.3	129.7		5'''	129.6	129.6	
6'''	130.2	130.6		6'''	130.7	130.6	
7'''	39.4	42.0		7'''	41.9	41.8	
8'''	170.1	172.9		8'''	172.9	172.9	

^a data were measured in DMSO- d_4 .

^b data were measured in MeOH- d_4 .

Table 7. ¹H NMR (500 MHz) data of inositol derivatives

position	7	8	9	10	11	12	13	14
1	5.27 (1H, t, 3.7)	5.19 (1H, t, 9.8)	5.08 (1H, t, 3.7)	3.97 (1H, t, 3.8)	3.82 (1H, t, 3.7)	5.14 (1H, t, 3.7)	5.07 (1H, dd, 9.6, 2.1)	5.10 (1H, t, 9.5)
2	5.07 (1H, dd, 10.0, 3.3)	3.92 (1H, t, 9.8)	5.25 (1H, t, 3.6)	4.87 (1H, dd, 9.4, 3.8)	3.60 (1H, dd, 9.7, 3.1)	3.91 (1H, dd, 9.8, 3.4)	4.01 (1H, d, 1.8)	3.49 (1H, dd, 10.0, 2.7)
3	3.63 (1H, overlap)	5.10 (1H, dd, 10.2, 3.1)	4.83 (1H, dd, 10.0, 3.3)	3.89 (1H, dd, 10.0, 9.4)	3.78 (1H, t, 9.6)	3.56 (1H, t, 9.5)	3.56 (1H, dd, 9.5, 2.6)	3.80 (1H, t, 3.3)
4	3.63 (1H, overlap)	4.04 (1H, t, 3.5)	3.64 (1H, overlap)	3.69 (1H, dd, 10.0, 9.5)	5.23 (1H, t, 10.4)	3.82 (1H, t, 9.5)	5.07 (1H, dd, 9.6, 2.1)	5.14 (1H, t, 3.3)
5	3.52 (1H, dd, 9.6, 3.2)	3.92 (1H, t, 3.2)	3.54 (1H, overlap)	5.10 (1H, dd, 10.1, 3.4)	5.13 (1H, dd, 10.5, 3.3)	4.81 (1H, dd, 10.2, 3.1)	4.01 (1H, d, 1.8)	3.94 (1H, dd 10.0, 3.0)
6	3.81 (1H, t, 3.5)	3.87 (1H, dd, 9.9, 3.1)	3.71 (1H, dd, 9.7, 3.3)	5.26 (1H, t, 3.8)	5.27 (1H, t, 3.7)	3.98 (1H, t, 3.1)	3.56 (1H, dd, 9.5, 2.6)	3.60 (1H, overlap)
2'	7.10 (2H, d, 8.5)	7.13 (2H, d, 8.6)	7.10 (2H, d, 8.5)	7.13 (2H, d, 8.6)	7.11 (2H, d, 8.5)	7.12 (2H, d, 8.5)	7.12 (1H, d, 8.5)	7.12 (2H, d, 8.5)
3'	6.74 (2H, d, 8.5)	6.72 (2H, d, 8.5)	6.71 (2H, d, 8.5)	6.74 (2H, d, 8.6)	6.73 (2H, d, 8.5)	6.73 (2H, d, 8.5)	6.73 (1H, d, 8.5)	6.73 (2H, d, 8.5)
5'	6.74 (2H, d, 8.5)	6.72 (2H, d, 8.5)	6.71 (2H, d, 8.5)	6.74 (2H, d, 8.6')	6.73 (2H, d, 8.5)	6.73 (2H, d, 8.5)	6.73 (1H, d, 8.5)	6.73 (2H, d, 8.5)
6'	7.10 (2H, d, 8.5)	7.13 (2H, d, 8.6)	7.10 (2H, d, 8.5)	7.13 (2H, d, 8.6)	7.11 (2H, d, 8.5)	7.12 (2H, d, 8.5)	7.12 (1H, d, 8.5)	7.12 (2H, d, 8.5)
7'	3.48 (2H, d, 2.3)	3.64 (2H, d, 2.3)	3.61 (2H, d, 4.3)	3.64 (2H, d, 2.4)	3.64 (2H, d, 2.4)	3.63 (2H, d, 3.6)	3.63 (1H, d, 3.6)	3.63 (2H, d, 3.6)
2''	7.00 (2H, d, 8.5)	7.12 (2H, d, 8.6)	7.10 (2H, d, 8.5)	6.99 (2H, d, 8.6)	7.13 (2H, d, 8.5)	7.10 (2H, d, 8.5)	7.12 (1H, d, 8.5)	7.10 (2H, d, 8.5)
3''	6.70 (2H, d, 8.5)	6.72 (2H, d, 8.5)	6.71 (2H, d, 8.5)	6.70 (2H, d, 8.6)	6.67 (2H, d, 8.5)	6.71 (2H, d, 8.5)	6.73 (1H, d, 8.5)	6.71 (2H, d, 8.5)
5''	6.70 (2H, d, 8.5)	6.72 (2H, d, 8.5)	6.71 (2H, d, 8.5)	6.70 (2H, d, 8.6)	6.67 (2H, d, 8.5)	6.71 (2H, d, 8.5)	6.73 (1H, d, 8.5)	6.71 (2H, d, 8.5)
6''	7.00 (2H, d, 8.5)	7.12 (2H, d, 8.6)	7.10 (2H, d, 8.5)	6.99 (2H, d, 8.6)	7.13 (2H, d, 8.5)	7.10 (2H, d, 8.5)	7.12 (1H, d, 8.5)	7.10 (2H, d, 8.5)
7''	3.36 (2H, m)	3.63 (2H, d, 1.8)	3.50 (2H, m)	3.35 (2H, s)	3.64 (2H, d, 2.4)	3.60 (2H, d, 3.2)	3.63 (2H, d, 3.6)	3.60 (2H, overlap)
2'''			7.10 (2H, d, 8.5')	7.11 (2H, d, 8.6)	7.08 (2H, d, 8.5)			
3'''			6.74 (2H, d, 8.5)	6.73 (2H, d, 8.6)	6.74 (2H, d, 8.5)			
5'''			6.74 (2H, d, 8.5)	6.73 (2H, d, 8.6)	6.74 (2H, d, 8.5)			
6'''			7.10 (2H, d, 8.5)	7.11 (2H, d, 8.6)	7.08 (2H, d, 8.5)			
7'''			3.50 (2H, m)	3.51 (2H, d, 1.6)	3.64 (2H, d, 2.4)			

All data were measured in MeOH-*d*₄

Table 8. ^{13}C NMR (125 MHz) data of inositol derivatives

Position	7	8	9	10	11	12	13	14
1	72.4	77.1	72.4	68.6	70.8	75.5	75.6	76.9
2	73.7	70.5	69.0	75.4	72.5	70.3	71.4	71.0
3	72.7	75.8	73.6	72.0	72.3	75.1	72.5	70.8
4	74.4	71.0	72.3	72.8	73.9	72.1	75.6	75.5
5	72.5	73.9	74.6	73.4	71.5	75.8	71.4	70.5
6	71.0	70.6	70.7	72.2	72.0	68.3	72.5	73.1
1'	126.3	126.7	126.1	126.4	126.5	126.4	126.5	126.4
2', 6'	131.7	131.7	131.6	131.6	131.6	131.6	131.6	131.6
3', 5'	116.5	116.3	116.5	116.5	116.5	116.4	116.3	116.4
4'	157.8	157.6	157.6	157.8	157.8	157.6	157.5	157.6
7'	41.4	41.2	40.9	40.9	41.3	41.1	41.0	41.1
8'	173.5	174.2	172.8	173.9	173.2	173.9	174.0	173.9
1''	126.2	126.5	126.0	126.2	125.9	126.2	126.5	126.2
2'', 6''	131.5	131.6	131.5	131.7	131.7	131.6	131.6	131.6
3'', 5''	116.3	116.2	116.5	116.3	116.3	116.3	116.3	116.3
4''	157.6	157.5	157.9	157.6	157.6	157.6	157.5	157.6
7''	40.9	41.0	41.2	40.9	40.6	40.9	41.0	40.9
8''	172.6	173.8	172.2	173.5	172.8	173.3	174.0	173.3
1'''			126.1	126.1	126.1			
2''', 6'''			131.7	131.6	131.6			
3''', 5'''			116.3	116.3	116.6			
4'''			157.6	157.6	157.7			
7'''			40.8	41.3	41.4			
8'''			173.4	172.6	172.6			

All data were measured in $\text{MeOH-}d_4$

Table 9 ^1H NMR (500 MHz) data of flavonoids

position	16	17	18	19
3	6.91 (1H,s)	6.92 (1H,s)	7.00 (1H,s)	6.66 (1H,s)
6	6.19 (1H, d, 2.1)	6.21 (1H, d, 2.0)	6.22 (1H, s)	6.18 (1H, d, 2.1)
8	6.51 (1H, d, 2.1)	6.48 (1H, d, 2.0)	6.58 (1H, s)	6.44 (1H, d, 2.1)
2'	7.56 (1H, s)	7.16 (1H, s)	7.34 (2H, s)	7.40 (1H, s)
5'	6.93 (1H, d, 8.9)			7.41 (1H, d, 8.4)
6'	7.57 (1H, dd, 8.9, 2.1)	7.16 (1H, s)	7.34 (2H, s)	7.41 (1H, dd, 8.4, 2.3)
OMe	3.89 (3H, s, 4'-OMe)	3.88 (3H, s, 3'-OMe) 3.75 (3H, s, 4'-OMe)	3.90 (6H, s, 3', 5'-OMe)	

All data were measured in DMSO- d_6 Table 10. ^{13}C NMR (125 MHz) data of flavonoids

Position	16	17	18	19
2	163.6	163.1	164.1	164.3
3	103.2	104.6	104.2	103.3
4	181.8	181.8	182.2	182.1
5	161.4	161.4	161.8	161.9
6	98.8	98.9	99.3	99.2
7	164.1	164.3	164.6	164.5
8	94	93.8	94.6	94.3
9	157.3	157.3	157.8	157.7
10	103.7	103.8	104	104.1
1'	121.5	125.8	120.8	122
2'	110.1	102.1	104.8	113.8
3'	148	150.8	148.6	146.1
4'	150.7	139.6	140.3	150.1
5'	115.7	153.5	148.6	116.4
6'	120.3	107.6	104.8	119.4
OMe	55.9	56.1 60.0	56.8	

All data were measured in DMSO- d_6

Table 11. ¹H NMR (500 MHz) data of flavonoids

Position	20 ^a	21 ^a	22 ^a	23 ^a	Position	15 ^b	24 ^b
3	7.05 (1H, s)	7.06 (1H, s)	7.05 (1H, s)	7.07 (1H, s)	2, 6	7.06 (2H, d, 8.5)	7.07 (2H, d, 8.4)
6	6.22 (1H, d, 1.8)	6.23 (1H, s)	6.23 (1H, s)	6.23 (1H, s)	3, 5	6.67 (2H, d, 8.5)	6.68 (2H, d, 8.4)
8	6.58 (1H, d, 1.8)	6.58 (1H, s)	6.58 (1H, s)	6.58 (1H, s)	7	2.86 (2H, t, 10.8)	2.88 (2H, t, 7.4)
2'	7.31 (2H, s)	7.31 (2H, s)	7.30 (2H, s)	7.32 (2H, s)	8	3.42 (2H, m)	3.44 (2H, m)
6'	7.31 (2H, s)	7.31 (2H, s)	7.30 (2H, s)	7.32 (2H, s)	3'	6.32 (1H, s)	6.18 (1H, d, 2.2)
2''	7.16 (2H, d, 8.4)	6.85 (1H, s)	6.86 (1H, s)	7.07 (2H, d, 8.4)	5'		5.95 (1H, d, 2.2)
3''	6.69 (2H, d, 8.4)		6.68 (2H, d, 8.4)		1''	5.02 (1H, d, 7.6)	5.04 (1H, d, 7.2)
5''		6.73 (2H, m)	6.72 (2H, m)		2''-5''	3.49-3.37 (4H, m)	3.49-3.38 (4H, m)
6''		6.73 (2H, m)	6.72 (2H, m)		6''	3.93 (1H, dd, 9.5, 4.9) 3.72 (1H, dd, 12.1, 5.9)	3.91 (1H, dd, 12.0, 1.6) 3.72 (1H, dd, 12.1, 5.4)
7''	4.78 (1H, t, 4.4)	4.42 (1H, d, 6.2)	4.42 (1H, d, 3.8)	4.85 (1H, t, 8.9)	1'''	4.37 (2H, s)	
8''	4.31 (1H, dd, 8.8, 4.9)	4.28 (1H, dd, 10.5, 4.9)	4.37 (1H, d, 4.9)	4.21 (1H, dd, 9.0, 4.4)	3'''	3.99 (1H, dd, J = 9.5, 4.9)	
9''	3.72 (1H, m)	3.56 (1H, m)	3.70 (1H, m)	3.67 (1H, m)	4'''	2.40 (1H, m), 2.16 (1H, m)	
	3.48 (1H, m)	3.17 (1H, d, 4.7),	3.52 (1H, m),	3.21 (1H, m)	5'''	2.07 (1H, m), 1.91 (1H, m)	
3',5'-OMe	3.87 (6H, s, 3',5'-OMe)	3.86 (6H, s, 3',5'-OMe)	3.86 (6H, s, 3',5'-OMe)	3.85 (6H, s, 3',5'-OMe)	6'''	3.64 (1H, m), 3.21 (1H, m)	
3''-OMe		3.74 (3H, s, 3''-OMe)	3.74 (3H, s, 3''-OMe)				
7''-OMe		3.06 (3H, s, 7''-OMe)	3.15 (3H, s, 7''-OMe)				

^a data were measured in DMSO-*d*₆.^b data were measured in MeOH-*d*₄.

Table 12. ^{13}C NMR (125 MHz) data of flavonoid derivatives

Position	20^a	21^a	22^a	23^a	Position	15^b	24^b
2	163.0	163.2	163.1	163.1	1	134.0	134.0
3	104.8	104.6	104.2	104.2	2	130.5	130.5
4	181.8	181.9	181.9	181.9	3	116.2	116.2
5	161.4	161.4	161.4	161.4	4	156.5	156.5
6	98.9	98.9	98.9	98.9	5	30.9	116.2
7	164.3	164.0	161.4	164.3	6	47.1	130.5
8	94.3	94.3	94.3	94.3	7	206.6	30.9
9	157.3	157.4	157.4	157.4	8	106.8	47.1
10	103.8	103.8	103.8	103.8	9	162.4	206.6
1'	125.2	124.8	125.2	125.2	1'	95.5	106.8
2'	104.2	104.1	104.2	104.2	2'	166.0	162.4
3'	152.9	152.9	152.9	152.9	3'	98.4	95.5
4'	139.3	140.7	139.2	139.9	4'	167.7	166.0
5'	152.9	152.9	152.9	152.9	5'	48.4	98.4
6'	104.2	104.1	104.2	104.2	6'	134.0	167.7
1''	132.5	129.5	129.2	132.3	1''	102.1	102.1
2''	127.9	111.3	111.4	127.8	2''	74.8	74.8
3''	114.3	147.3	147.2	114.3	3''	78.6	78.6
4''	156.2	146.0	145.9	156.2	4''	71.1	71.1
5''	114.3	115.0	114.8	114.3	5''	78.5	78.5
6''	127.9	120.0	120.4	127.8	6''	62.5	62.5
7''	71.9	83.5	82.3	71.5	1'''	48.4	
8''	86.4	85.4	85.2	87.0	2'''		
9''	60.0	60.6	59.9	60.3	3'''	69.8	
3',5'-OMe	56.3	56.3	56.5	56.3	4'''	30.3	
3''-OMe		55.5	55.5		5'''	24.9	
7''-OMe		56.2	56.3		6'''	55.4	
					7'''	173.7	

^a data were measured in DMSO- d_6 .^b data were measured in MeOH- d_4 .

Table 13. ¹H NMR (500 MHz) data of flavonoid glycosides

position	25 ^a	26 ^b	27 ^b	28 ^b
3	6.75 (1H, s)		6.61 (1H, s)	6.62 (1H, s)
6	6.45 (1H, d, 2.0)	6.20 (1H, d, 2.0)	6.60 (1H, d, 2.1)	6.51 (1H, d, 1.9)
8	6.74 (1H, d, 2.0)	6.45 (1H, d, 2.0)	6.80 (1H, d, 2.1)	6.81 (1H, d, 1.9)
2'	7.41 (1H, d, 2.0)	7.93 (1H, d, 2.0)	7.43 (1H, s)	7.42 (1H, s)
5'	6.91 (1H, d, 8.4)	6.92 (1H, d, 8.5)	6.93 (1H, d, 8.8)	6.91 (1H, d, 8.3)
6'	7.45 (1H, dd, 8.4, 2.0)	7.58 (1H, dd, 8.5, 2.0)	7.44 (1H, m)	7.42 (1H, m)
1''	5.08 (1H, d, 7.3)	5.68 (1H, d, 7.3)	5.08 (1H, d, 7.1)	5.07 (1H, d, 5.4)
6''	3.84 (1H, d, 10.7) 3.62 (1H, m)	3.57 (1H, m), 3.34 (1H, m)	4.20 (1H, d, 10.0) 3.82 (1H, m)	3.94 (1H, d, 11.1) 3.72 (1H, dd, 11.1, 5.7)
1'''	4.54 (1H, s)	4.79 (1H, d, 4.7)	4.37 (1H, d, 7.6)	
5'''		3.68 (1H, dd, 11.5, 6.1) 3.21 (1H, d, 8.9)		
6'''	1.07 (3H, d, 6.2)		3.87 (1H, d, 11.9, 1.9) 3.68 (1H, dd, 11.9, 6.0)	
OMe		3.85 (3H, s, -OMe)		

^a data were measured in DMSO-*d*₆.^b data were measured in MeOH-*d*₄.

Table 14. ^{13}C NMR (125 MHz) data of flavonoid glycosides

position	25 ^a	26 ^b	27 ^b	28 ^b
2	162.9	156.0	167.1	167.0
3	103.2	132.8	104.3	104.2
4	181.9	177.2	184.2	184.2
5	161.2	161.2	163.1	163.0
6	100.5	98.7	101.3	101.2
7	164.5	164.2	164.9	164.9
8	94.7	93.7	96.3	96.1
9	156.9	156.3	159.0	159.1
10	105.3	104.0	107.2	107.2
1'	121.4	121.0	123.6	123.6
2'	113.5	113.2	114.4	114.3
3'	145.7	146.9	147.2	147.2
4'	149.9	149.5	151.3	151.4
5'	116	115.2	117.0	116.9
6'	119.2	122.3	120.7	120.6
1''	99.8	98.5	101.7	101.7
2''	73.1	79.6	75.2	74.8
3''	76.2	77.1	78.2	77.9
4''	69.5	69.6	71.7	71.3
5''	75.5	77.4	77.3	78.5
6''	66.0	60.4	70.3	62.5
1'''	99.5	102.3	105.1	
2'''	70.7	70.6	74.8	
3'''	70.3	72.0	77.8	
4'''	72.0	65.8	71.4	
5'''	68.3	62.4	78.1	
6'''	17.8		62.9	
OMe		55.6		

^a data were measured in DMSO- d_6 .

^b data were measured in MeOH- d_4 .

Table 15 ¹H NMR (500 MHz) data of megastigmane and sesquiterpene derivatives

position	32	33	34	35	36	position	29	30	31
2	2.31 (1H, d, 5.1) 1.62 (1H, dd, 14.3, 9.2)	1.82 (1H, d, 12.6) 1.48 (1H, dd, 12.4, 2.4)	1.94 (1H, d, 12.6) 1.65 (1H, dd, 12.4, 3.2)	2.53 (1H, d, 17.0) 2.15 (1H, dd, 17.0)	2.62 (1H, d, 16.8) 2.17 (1H, d, 16.8)	1	5.82 (1H, d, 9.9)	5.84 (1H, dd, 12.8, 3.7)	3.55 (1H, dd, 11.7, 4.0)
3	3.76 (1H, m)	3.79 (1H, m)	4.02 (1H, dt, 12.8, 3.5)			2	3.39 (1H, m) 2.28 (1H, m)	3.39 (1H, m) 2.32 (1H, m)	1.98 (1H, m) 1.77 (1H, q, 12.2)
4	1.58 (1H, ddd, 12.8, 3.2, 1.7) 1.26 (1H, dd, 9.8, 2.9)	3.88 (1H, d, 3.5)	4.13 (1H, d, 3.4)	5.87 (1H, m)	5.87 (1H, m)	3	2.34 (1H, m) 2.27 (1H, m)	2.37 (1H, m) 2.30 (1H, m)	3.77 (1H, m)
7	7.17 (1H, d, 15.8)	7.28 (1H, d, 16.4)	7.28 (1H, d, 16.4)	5.86 (1H, m)	5.98 (1H, d, 15.6)	4			2.33 (1H, dd, 12.4, 5.2)
8	6.18 (1H, d, 15.8)	6.15 (1H, d, 16.5)	6.14 (1H, d, 16.5)	5.86 (1H, m)	5.73 (1H, dd, 15.6, 7.2)	5	4.88 (1H, m)	4.98 (1H, dd, 10.1, 1.1)	1.63 (1H, dd, 11.5, 4.4)
9				4.42 (1H, m)	4.54 (1H, m)	6	4.73 (1H, t, 9.7)	4.74 (1H, dd, 10.1, 8.7)	4.16 (1H, t, 11.1)
10	2.28 (3H, s)	2.32 (3H, s)	2.32 (3H, s)	1.29 (3H, d, 6.4)	1.29 (3H, d, 6.4)	7	1.77 (1H, d, 11.9)	2.72 (1H, m)	2.54 (1H, td, 11.3, 3.1)
11	1.19 (3H, s)	1.09 (3H, s)	1.10 (3H, s)	1.03 (3H, s)	1.02 (3H, s)	8	2.03 (1H, m) 1.93 (1H, dd, 12.9, 6.4)	2.23 (1H, m) 2.09 (1H, m)	2.04 (1H, m) 1.55 (1H, dd, 12.7, 2.7)
12	0.96 (3H, s)	1.13 (3H, s)	1.15 (3H, s)	1.04 (3H, s)	1.04 (3H, s)	9	2.82 (1H, d, 11.7) 2.03 (1H, m)	2.89 (1H, dd, 12.2, 5.8) 2.13 (1H, m)	2.06 (1H, m) 1.33 (1H, m)
13	1.18 (3H, s)	1.88 (3H, s)	1.89 (3H, s)	1.92 (3H, d, 1.2)	1.95 (3H, d, 1.2)	11	2.36 (1H, m)		
1'			4.51 (1H, d, 7.8)	4.34 (1H, d, 7.8)	4.27 (1H, d, 7.7)	13	1.21 (3H, d, 7.0)	6.18 (1H, d, 3.6) 5.64 (1H, d, 3.6)	5.99 (1H, d, 3.2) 5.48 (1H, d, 3.2)
2'-5'			3.38-3.23 (4H, m)	3.34-3.17 (4H, m)	3.37-3.14 (4H, m)	14			1.06 (3H, s)
6'			3.87 (1H, d, 11.6) 3.68 (1H, d, 10.9, 5.0)	3.85 (1H, dd, 11.7, 1.7) 3.62 (1H, dd, 11.7, 5.5)	3.85 (1H, dd, 12.0, 1.8) 3.63 (1H, dd, 11.9, 6.2)	15	1.63 (3H, s)	1.64 (3H, d, 1.2)	1.00 (3H, d, 7.5)
						1'	5.54 (1H, d, 8.0)	5.54 (1H, d, 8.0)	4.33 (1H, d, 7.8)
						2'-5'	3.34-3.36 (4H, m')	3.43-3.36 (4H, m)	3.35-3.14 (4H, m)
						6'	3.83 (1H, d, 12.6)	3.83 (1H, dd, 12.2, 1.8)	3.87 (1H, d, 11.6)
							3.69 (1H, dd, 12.0, 4.5)	3.69 (1H, dd, 12.0, 4.5)	3.64 (1H, m)

All data were measured in MeOH-*d*₄

Table 16. ^{13}C NMR (125 MHz) data of megastigmane and sesquiterpene derivatives

Position	32	33	34	35	36	Position	29	30	31
1	36.2	37.0	38.0	42.5	42.5	1	150.0	149.8	84.0
2	41.4	42.4	40.2	50.8	50.8	2	27.7	27.8	31.8
3	64.5	66.8	75.8	201.3	201.4	3	40.2	40.1	71.5
4	47.8	71.9	70.1	127.3	127.2	4	143.3	142.1	35.6
5	68.9	134.3	132.5	167.4	167.3	5	127.5	127.4	49.4
6	71.0	138.7	141.4	80.1	80.1	6	83.4	84.0	81.7
7	145.5	142.5	144.3	131.6	133.8	7	55.7	51.3	52.2
8	133.9	133.7	134.8	135.4	133.9	8	31.4	31.5	22.6
9	200.4	197.7	201.0	77.4	75.0	9	37.5	37.4	40.5
10	27.5	27.4	27.9	21.3	22.4	10	132.0	132.9	42.1
11	29.9	27.6	27.3	23.5	23.6	11	43.6	144.7	142.0
12	25.2	30.0	30.3	24.8	24.8	12	181.7	172.9	173.0
13	20.1	20.2	20.2	19.7	19.7	13	13.4	120.5	117.2
1'			102.9	102.8	101.3	14	168.0	168.0	16.4
2'			75.4	75.3	74.7	15	17.3	17.4	9.5
3'			78.1	78.2	78.5	1'	95.5	95.6	101.9
4'			71.7	71.7	71.8	2'	74.2	74.1	75.1
5'			78.2	78.1	78.3	3'	78.5	78.5	78.3
6'			62.8	62.9	62.9	4'	71.2	71.3	71.9
						5'	79.0	79.0	78.0
						6'	62.5	62.5	62.1

All data were measured in $\text{MeOH-}d_4$

Table 17 ^1H NMR (500 MHz) data of others

Position	37^b	43^b	44^b	45^b	Position	41^b	46^a	Position	39^b	40^b
2	7.03 (1H, d, 1.5)		6.75 (2H, s)	6.55(2H, s)	2	8.35(1H, s)		2	1.99 (1H, d, 14.4) 1.53 (1H, dd, 14.4, 3.6)	2.01 (1H, ddd, 13.0, 4.2, 2.2) 1.28 (1H, m)
3		6.29 (1H, d, 9.5)			4	8.17 (1H, d, 7.3)	7.44 (1H, d, 7.8)	3	4.22 (1H, m, H-3)	4.10 (1H, tt, 11.5, 4.2)
4		7.83 (1H, d, 9.5)			5	7.20 (1H, m)	6.98 (1H, t, 7.8)	4	2.42 (1H, d, 13.6) 1.75 (1H, m)	2.47 (1H, ddd, 11.7, 3.9, 2.2) 1.42 (1H, t, 11.6)
5	6.77 (1H, d, 8.1)	7.04 (1H, s)			6	7.20 (1H, m)	7.06 (1H, t, 7.8)	7	5.75 (1H, s)	5.78 (1H, s)
6	7.03 (1H, dd, 8.1, 1.5)		6.75 (2H, s)	6.55 (2H, s, H-2, 6)	7	7.48 (1H, d, 7.3)	7.32 (1H, d, 7.8)	9	1.47 (3H, s)	1.29 (3H, s)
7	7.54 (1H, d, 15.9)		6.55 (1H, d, 15.9)	2.64 (2H, m)	10		4.17 (2H, d, 15.4)	10	1.76 (3H, s)	1.59 (3H, s)
8	6.26 (1H, d, 15.9)	7.20 (1H, s)	6.33 (1H, dt, 15.9, 5.6)	1.83 (2H, m)	11	4.58 (2H, d, 5.4)	3.55 (1H, dd, 10.9, 4.4)	11	1.28 (3H, s)	1.31 (3H, s)
9			4.23 (2H, dd, 5.6, 1.5)	3.57 (2H, t, 6.4)	13		3.11 (1H, dd, 15.9, 4.5) 2.78 (1H, dd, 15.5, 10.5)			
OMe or 10	3.76 (3H, s, -OMe)		3.86 (6H, s, -OMe)	3.83 (6H, s, -OMe)						
1'		4.99 (1H, d, 7.3)	4.88 (1H, d, 7.6)	4.80 (1H, d, 7.6)						
2'-5'		3.53-3.26 (4H, m)	3.48-3.20 (4H, m)	3.48-3.20 (4H, m)						
6'		3.93 (1H, dd, 12.1, 2.2) 3.72 (1H, dd, 12.1, 5.7)	3.78 (1H, dd, 12.0, 2.3) 3.66 (1H, dd, 12.0, 5.2)	3.78 (1H, m) 3.67 (1H, m)						

^a data were measured in DMSO-*d*₆.^b data were measured in MeOH-*d*₄.

Table 18. ^{13}C NMR (125 MHz) data of others

Position	37^b	43^b	44^b	45^b	Position	41^b	46^a	Position	39^b	40^b
1	127.8		135.3	140.5	1			1	37.3	36.3
2	115.2	163.7	105.5	107.4	2	133.3	128.1	2	48.1	50.9
3	146.9	114.8	154.4	154.2	3	113.1	106.8	3	67.3	65.4
4	149.7	145.7	135.9	134.5	4	121.1	117.7	4	45.5	50.0
5	116.6	114.0	154.4	154.2	5	121.7	118.7	5	89.1	88.7
6	123.0	145.6	105.5	107.4	6	122.7	121.2	6	185.8	184.0
7	147.0	150.5	131.4	33.5	7	112.1	111.1	7	113.4	113.8
8	114.9	105.4	130.1	35.6	8	136.2	136.2	8	174.5	174.1
9	169.9	149.7	63.7	62.2	9	125.4	126.7	9	27.1	25.4
OMe or10	52.1	115.4	57.1	57.1	10	194.3	23.1	10	27.5	25.9
1'		103.1	105.4	105.7	11	65.2	56.7	11	31.1	30.4
2'		74.8	75.8	75.8	12					
3'		78.6	78.5	78.4	13		40.5			
4'		71.3	71.4	71.4	14		169.6			
5'		77.5	77.9	77.9						
6'		62.4	62.6	62.6						

^a data were measured in DMSO- d_6 .^b data were measured in MeOH- d_4 .

Table 19. ^1H NMR (125 MHz) data of others

Position	38	42	47	48	49
1				9.54 (1H, s)	
2	9.03 (1H, s)	8.18 (1H, s)	4.30 (1H, dd, 9.0, 4.4)		
3			2.47 (1H, m), 2.16 (1H, m)	7.39 (1H, d, 3.6)	
4	8.69 (1H, d, 4.0)		2.33 (2H, m)	6.59 (1H, d, 3.6)	7.28-7.39 (5H, m)
5	7.55 (1H, ddd, 8.0, 4.9, 0.5)				
6	8.29 (1H, m)			4.61 (2H, s)	
7					3.78 (1H, dd, 9.0, 4.3) 4.00 (1H, dd, 14.5, 9.0)
8		8.32 (1H, s)			4.61 (1H, s)
OCH ₃			3.76 (3H, s)		
1'		5.96 (1H, d, 6.5)			
2'		4.74 (1H, dd, 6.4, 5.2)			
3'		4.32 (1H, dd, 5.0, 2.5)			
4'		4.17 (1H, dd, 5.0, 2.5)			
5'		3.89 (1H, dd, 12.5, 2.4) 3.75 (1H, dd, 12.6, 2.6)			

All data were measured in MeOH- d_4

Table 20. ^{13}C NMR (125 MHz) data of others

Position	38	42	47	48	49
1	131.5			179.5	137.4
2	149.6	153.6	57.1	154.0	130.1
3			25.9	124.8	130.5
4	152.9	150.1	30.4	111.0	128.5
5	125.3	121.1	181.2	163.3	130.5
6	137.5	157.7	174.6	57.8	130.1
7	169.9				38.4
8		142.1			57.7
9					179.5
OCH ₃			53.0		
1'		91.4			
2'		75.6			
3'		72.8			
4'		88.3			
5'		63.6			

All data were measured in MeOH- d_4

2.3 알파글루코시데이즈 억제 활성

알파글루코시데이즈 억제 활성을 측정하기 위하여 문헌의 방법 (Escadon-Rivera et al., 2012) 을 수정하여 실시하였다. 알파글루코시데이즈 효소를 0.11 U/ml 가 되도록 50mM PBS buffer로 희석하여 stock solution을 만든다. 시료 (10 μ l) 와 효소 stock solution (45 μ l)을 plate에 넣고 36 $^{\circ}$ C에 방치한다. 그 후 1.35 mM *p*-nitrophenyl- α -D-glucopyranoside (*p*NPG) 45 μ l를 넣고 10분간 반응을 시킨 후, microplate reader로 405 nm에서 2.5분 단위로 흡광도를 측정한다. PBS 버퍼를 control로 사용하며, acarbose를 positive control로 사용한다. 억제율은 $[1-(\Delta\text{Abs}_{\text{sample}}/\Delta\text{Abs}_{\text{control}})] \times 100$ 로 계산하였다. 모든 실험은 세 번 반복하였으며, IC₅₀ 값은 최소 여섯 개의 농도 하에 구하였다.

저해 유형은 Lineweaver-Burk plot 을 통해 구하였다. 여러 농도의 *p*NPG 를 405 nm 에서 1 분 단위로 측정하였다.

III. 결과 및 고찰

1. 화합물 구조동정

1.1 화합물 1의 구조

화합물 1 은 무색무정형 화합물로 분자량 m/z 555.1465 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{26}H_{28}O_{12}Na$, 555.1478) 를 통해 분자식 $C_{26}H_{28}O_{12}$ 을 구하였다. 1H NMR spectrum에서 두 개의 1, 4-치환체 [δ_H 6.98 (2H, d, $J = 8.5$ Hz), 6.91 (2H, d, $J = 8.5$ Hz), 6.69 (2H, d, $J = 8.5$ Hz), 6.68 (2H, d, $J = 8.5$ Hz)], 하나의 anomeric proton [δ_H 4.75 (1H, d, $J = 8.1$ Hz)], 하나의 methylene group [δ_H 2.80 (1H, dd, $J = 17.8, 5.9$ Hz), 2.18 (1H, d, $J = 17.7$ Hz)], 두 개의 oxygenated methylene group [δ_H 4.36 (1H, dd, $J = 10.4, 4.3$ Hz), 4.33 (1H, t, $J = 9.6$ Hz), 3.68 (1H, dd, $J = 11.1, 5.4$ Hz), 3.49 (1H, m)], 두 개의 carbonyl methylene proton (δ_H 3.38 (2H, m), 3.26 (2H, m) 그리고 다섯 개의 oxygenated proton [δ_H 4.99 (1H, t, $J = 9.6$ Hz), 4.61 (1H, dd, $J = 9.8, 8.1$ Hz), 4.53 (1H, dd, $J = 6.1, 4.6$ Hz), 3.40 (1H, m), 3.37 (1H, m)]을 확인하였다. ^{13}C NMR spectrum에서 여덟 개의 aromatic carbon (δ_C 156.2, 156.1, 130.2, 130.1, 124.2, 123.8, 115.3, 115.0), 세 개의 carbonyl carbon (δ_C 175.5, 170.1, 170.1), 두 개의 carbonyl methylene carbon (δ_C 39.4, 39.1), 하나의 methylene carbon (δ_C 34.9), 하나의 anomeric carbon (δ_C 98.7), 일곱 개의 oxygenated carbon (δ_C 76.6, 74.9, 74.8, 73.7, 71.2, 67.6, 60.2) 을 확인할 수 있었다. 1H - 1H COSY 에서 H-3/H-4, H-4/H-5 의 correlation 그리고 HMBC 에서 H-4/C-2, H-5/C-2, H-7'''/C-2'' 과 C-8'', H-7'''/C-2'''과 C-8'''

의 correlation 으로 두 개의 4-hydroxyphenylacetyl 기와 γ -butyrolactone 부분구조를 동정하였다 (Fig. 2). ^{13}C NMR spectrum의 δ_{C} 98.7, 76.6, 74.9, 71.2, 67.6, 60.2 signal과 anomeric proton의 coupling constant ($J = 8.1$ Hz) 그리고 LC 분석을 통하여 D-glucose의 존재를 확인할 수 있다 (Tanaka et al., 2007). HMBC correlation (H-1'/C-4, H-2'/C-8'', H-3'/C-8'')을 통하여 부분구조들을 연결할 수 있다. C-4 위치의 절대구조는 Mosher's method를 통하여 구하였다. 화합물 **1** 을 β -glucosidase를 통하여 분해하였고, butyrolactone과 (R), (S)-MTPA-Cl을 반응시켜 (S)-, (R)-MTPA esters를 얻는다. $\Delta\delta_{\text{H}}^{\text{SR}}$ 값을 통하여 C-4를 R형으로 동정하였고, 이를 토대로 화합물 **1** 을 4R-O-[2,3-di-O-(4-hydroxyphenylacetyl)- β -D-glucopyranosyl]- γ -butyrolactone으로 동정하였고, taraxiroside A로 명명하였다.

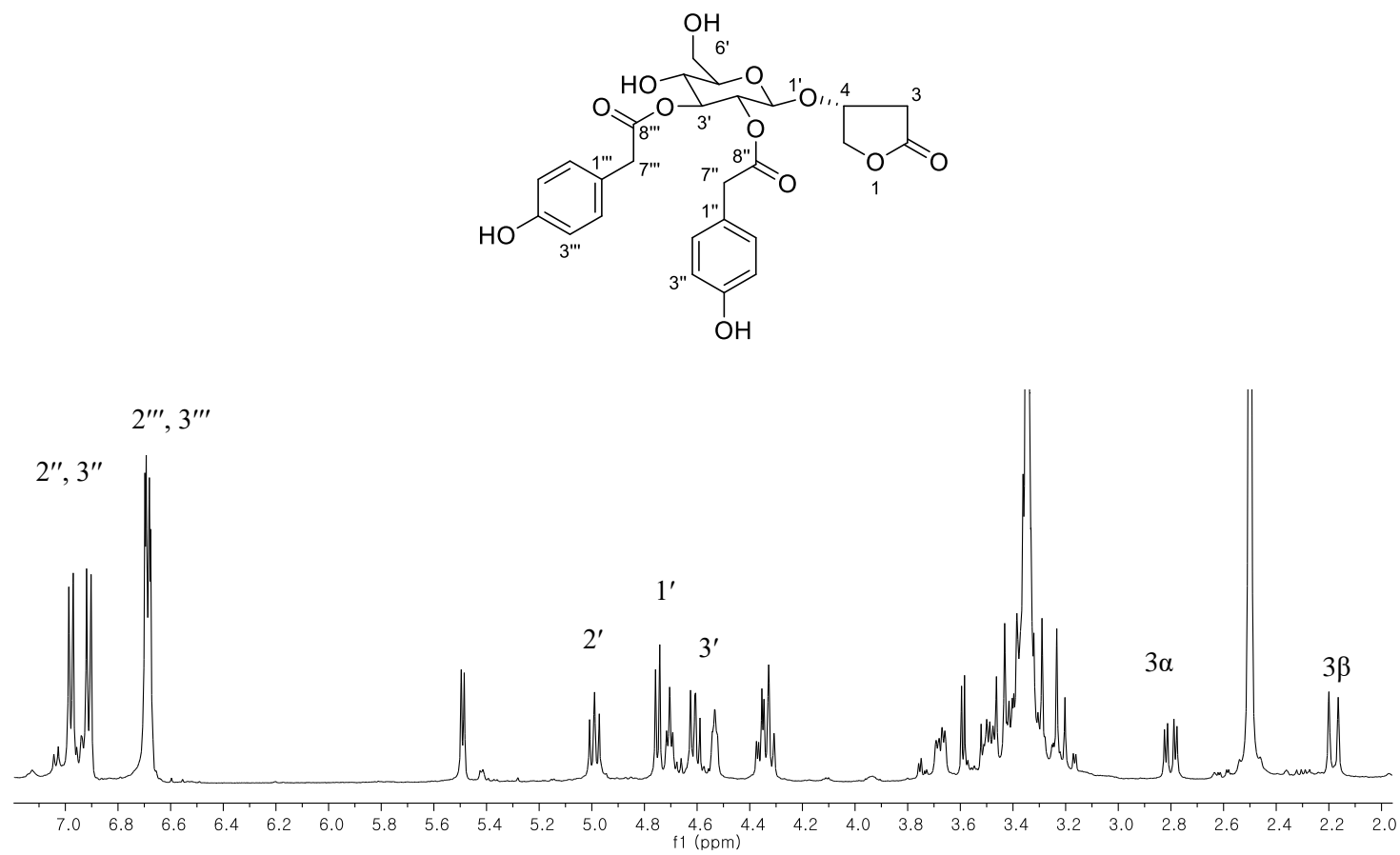
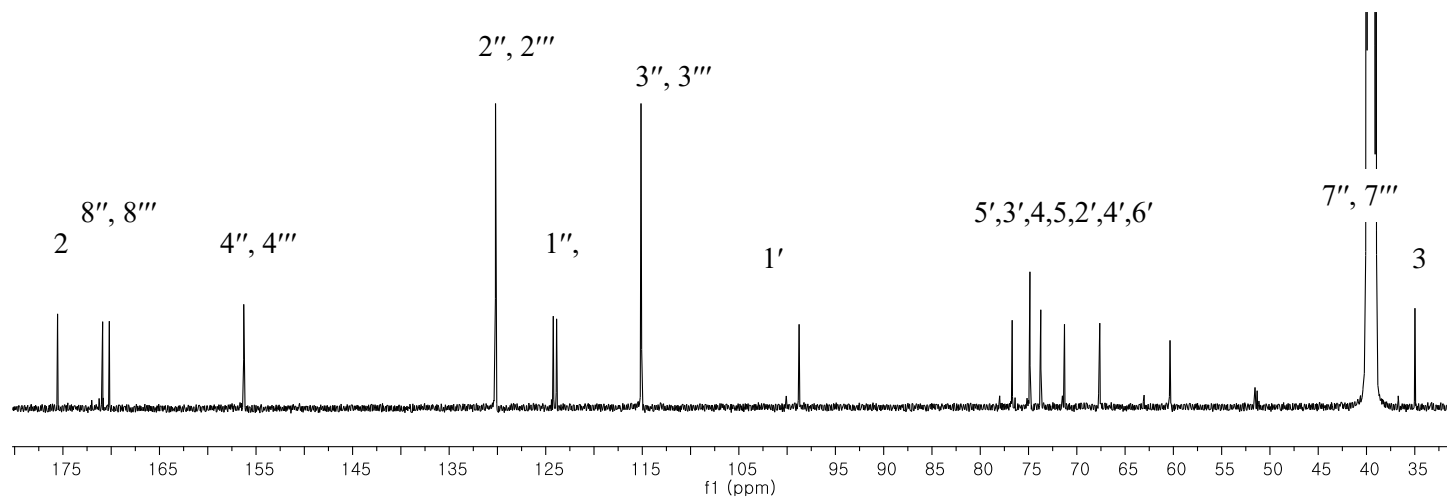


Fig. 4. ^1H -NMR spectrum of compound **1**



63

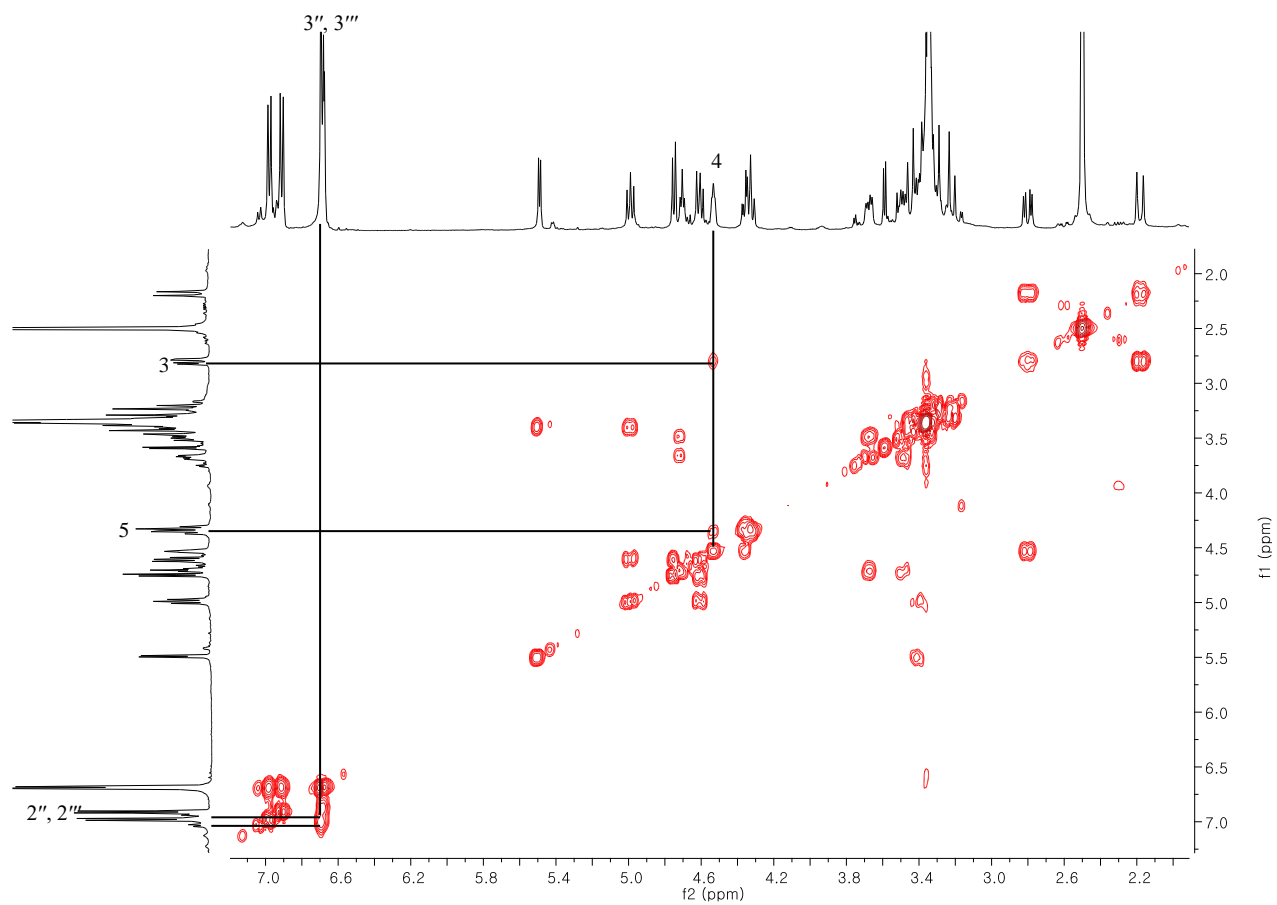


Fig. 6. ^1H - ^1H COSY spectrum of compound **1**

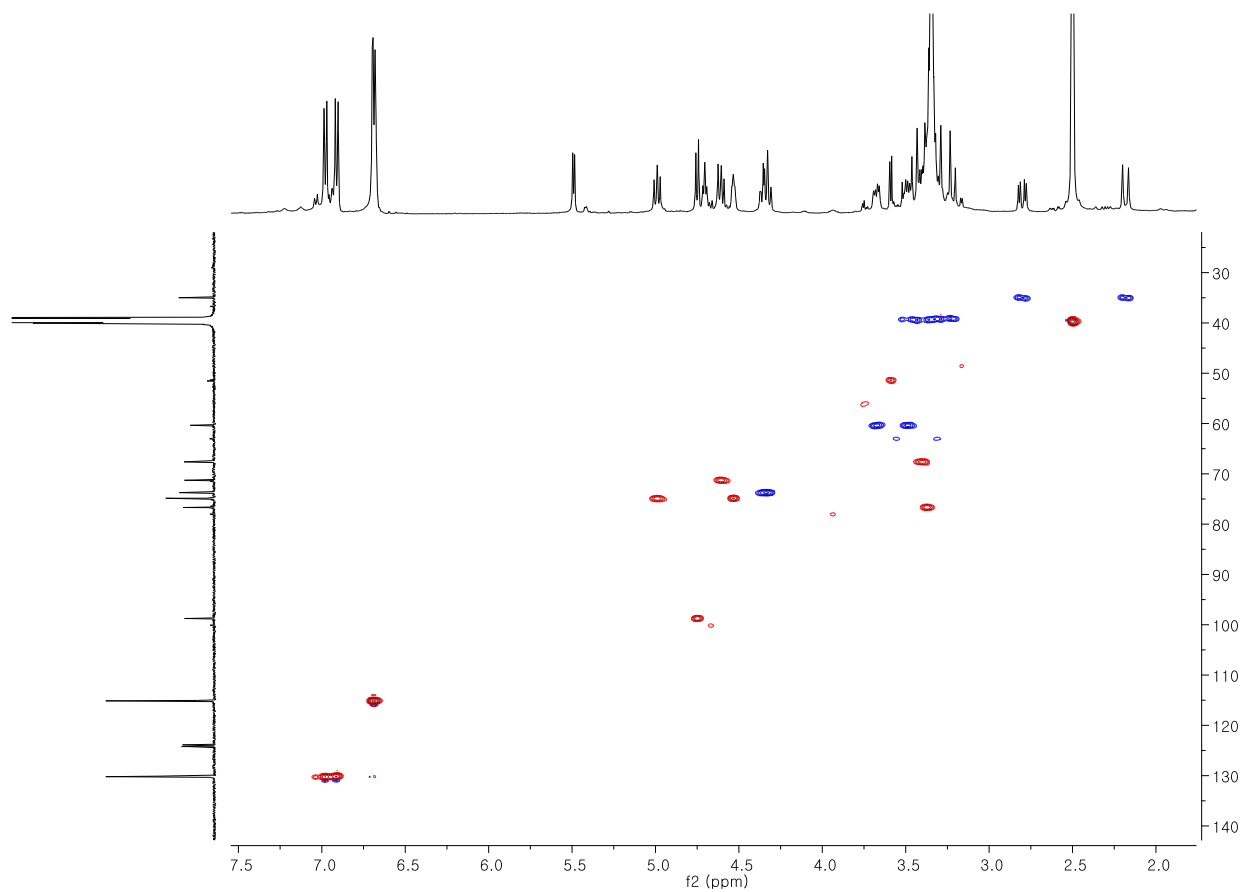


Fig. 7. HSQC spectrum of compound **1**

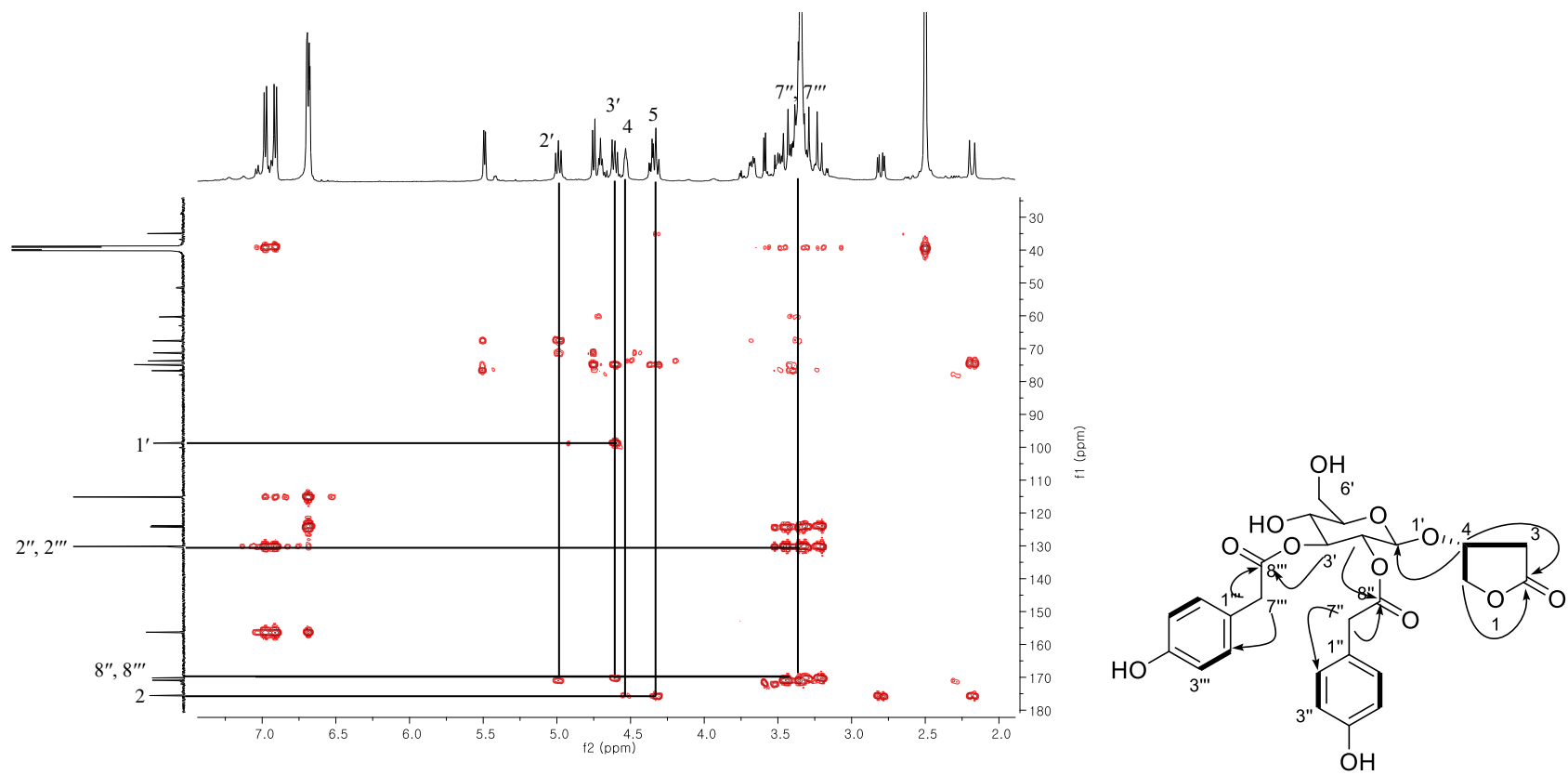


Fig. 8. HMBC spectrum of compound 1

1.2 화합물 2의 구조

Taraxiroside B (2)는 무색무정형 화합물이며 분자량 m/z 561.1602 $[M+HCOO]^-$ (calcd. for $C_{27}H_{29}O_{13}$, 561.1608)을 통해 분자식 ($C_{26}H_{28}O_{11}$)을 동정하였다. 화합물 2의 1H , ^{13}C NMR spectra는 화합물 1의 spectra와 거의 유사하나 당 3번 위치의 functional group이 phenylacetyl기로 대체되어 있다. 1H NMR spectrum에서 한 개의 1, 4-치환체 [δ_H 6.97 (2H, d, $J = 8.6$ Hz), 6.72 (2H, d, $J = 8.6$ Hz)], 한 개의 phenyl기 [δ_H 7.30 (2H, t, $J = 7.1$ Hz), 7.26 (1H, d, $J = 7.2$ Hz), 7.22 (2H, d, $J = 6.8$ Hz)], 하나의 anomeric proton [δ_H 4.64 (1H, d, $J = 8.0$ Hz)], 하나의 methylene group [δ_H 2.68 (1H, dd, $J = 18.0$, 6.2 Hz), 2.13 (1H, d, $J = 18.0$ Hz)], 두 개의 oxygenated methylene group [δ_H 4.41 (1H, t, $J = 9.4$ Hz), 4.37 (1H, dd, $J = 10.4$, 4.3 Hz), 3.86 (1H, dd, $J = 12.1$, 2.2 Hz), 3.69 (1H, dd, $J = 12.5$, 5.5 Hz)], 두 개의 carbonyl methylene proton [δ_H 3.55 (2H, d, $J = 15.5$ Hz), 3.25 (2H, d, $J = 5.1$ Hz)] 그리고 다섯 개의 oxygenated proton [δ_H 5.11 (1H, t, 9.5 Hz), 4.77 (1H, dd, $J = 9.8$, 8.1 Hz), 4.53 (1H, t, $J = 6.1$ Hz), 3.57 (1H, m), 3.41 (1H, ddd, $J = 9.8$, 5.5, 2.2 Hz)]을 확인하였다. ^{13}C NMR spectrum에서 여덟 개의 aromatic carbon (δ_C 157.8, 135.5, 131.6, 130.6, 129.7, 128.2, 126.0, 116.5), 세 개의 carbonyl carbon (δ_C 178.1, 172.9, 172.4), 두 개의 carbonyl methylene carbon (δ_C 42.0, 41.1), 하나의 methylene carbon (δ_C 36.1), 하나의 anomeric carbon (δ_C 101.2), 일곱 개의 oxygenated carbon (δ_C 78.1, 76.8, 76.6, 75.8, 73.1, 69.5, 62.2)을 확인할 수 있다. HMBC correlation H-3'/ C-8'''을 통해 phenylacetyl기가

당 3번 위치에 연결되어 있음을 알 수 있다 (Fig. 2). 화합물 1번과 같은 Mosher's method를 통하여 C-4의 절대구조를 동정하였고, *R*형으로 동정하였다. 그 결과 화합물 2를 4*R*-*O*-[2-*O*-(4-hydroxyphenylacetyl)-3-*O*-(phenylacetyl)- β -D-glucopyranosyl]- γ -butyrolactone으로 동정하였고, taraxiroside B로 명명하였다.

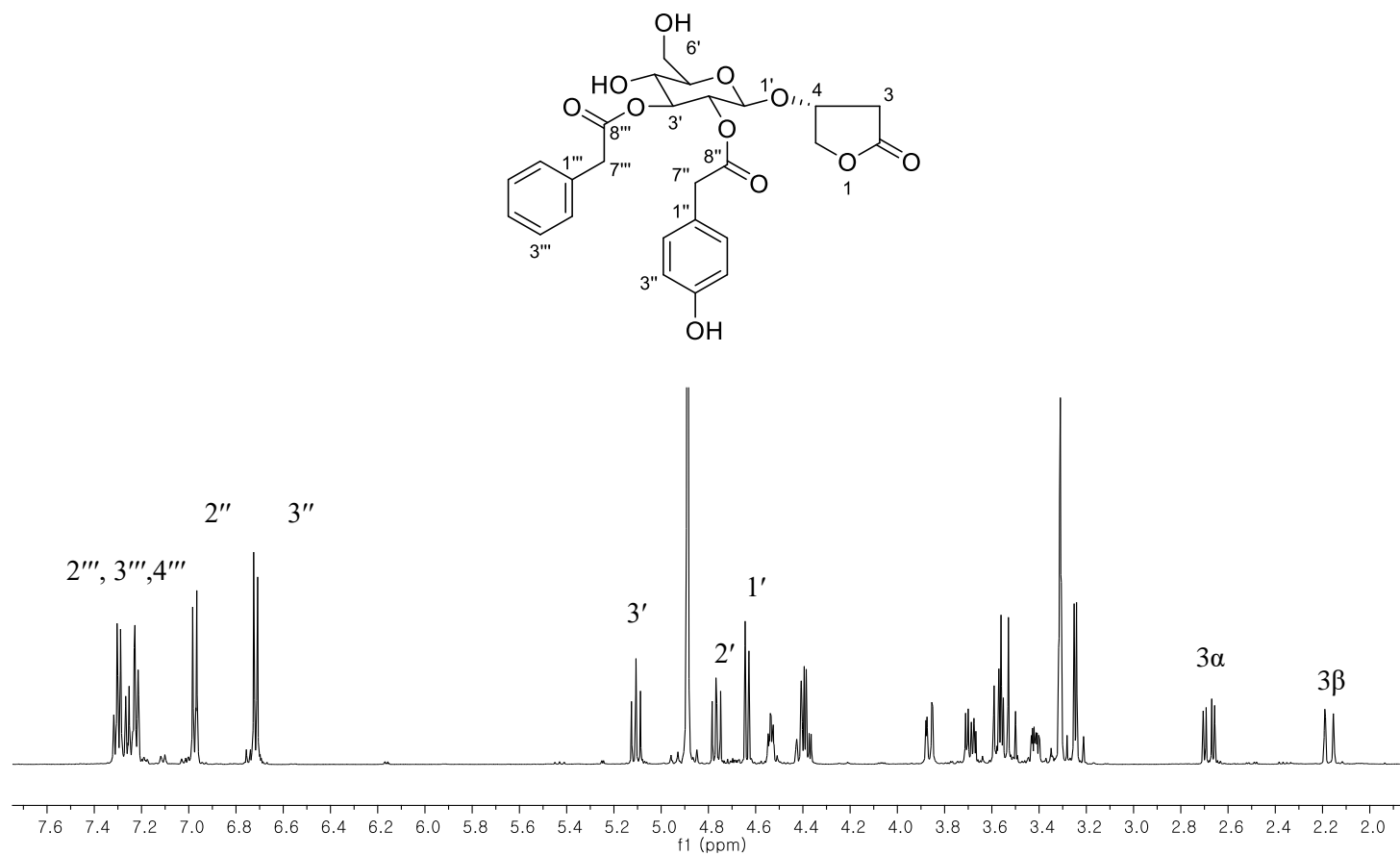


Fig. 9. ^1H -NMR spectrum of compound 2

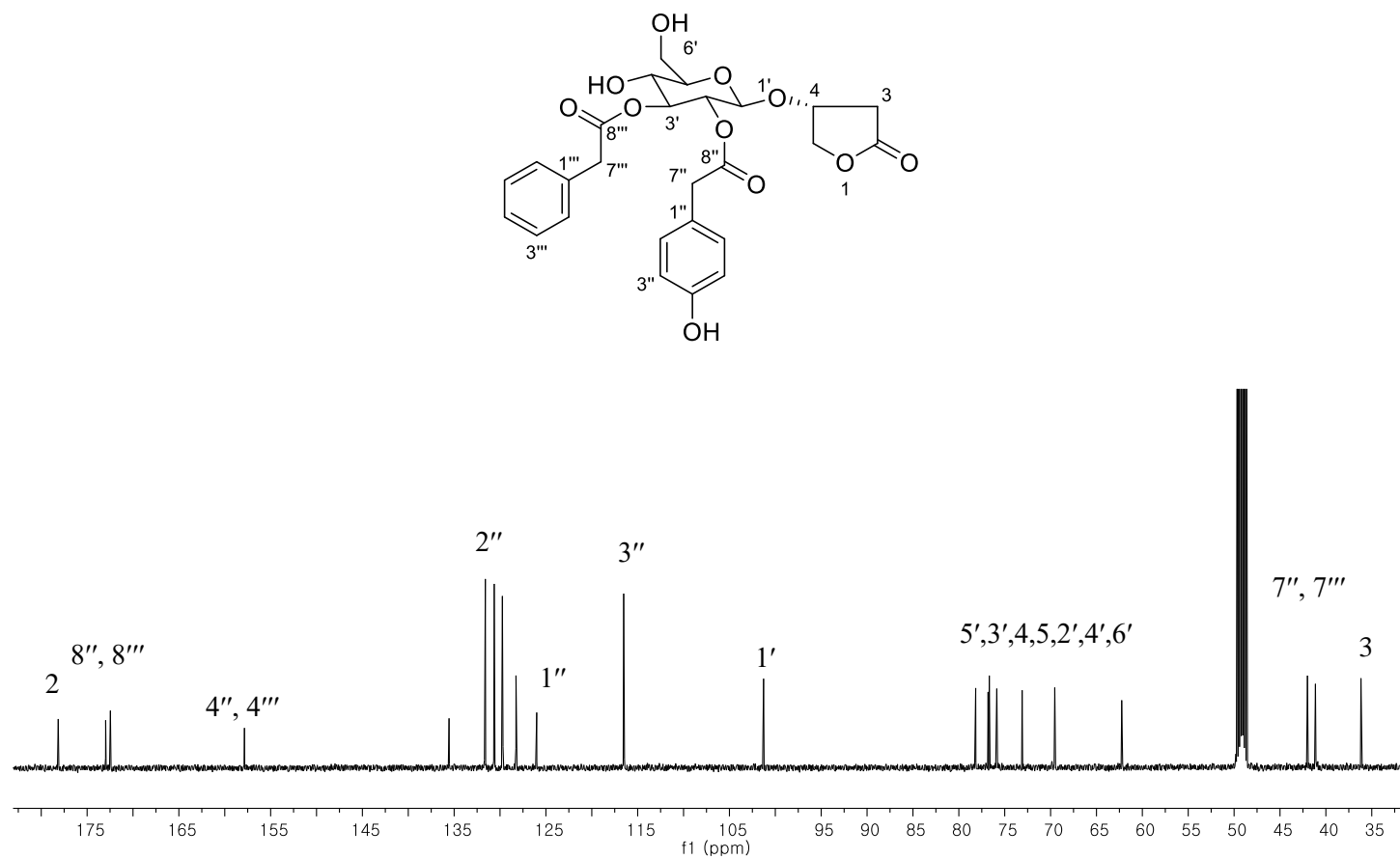


Fig. 10. ^{13}C -NMR spectrum of compound 2

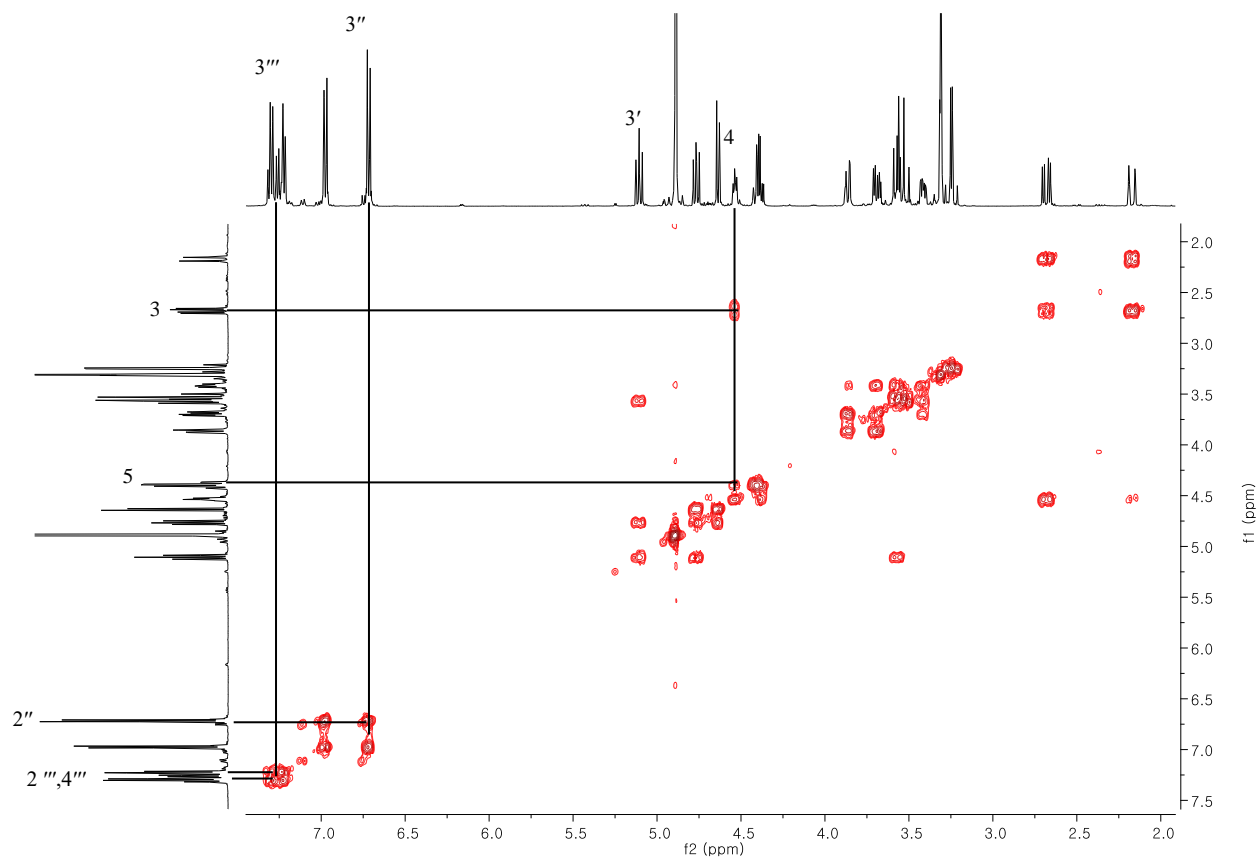


Fig. 11. ^1H - ^1H COSY spectrum of compound **2**

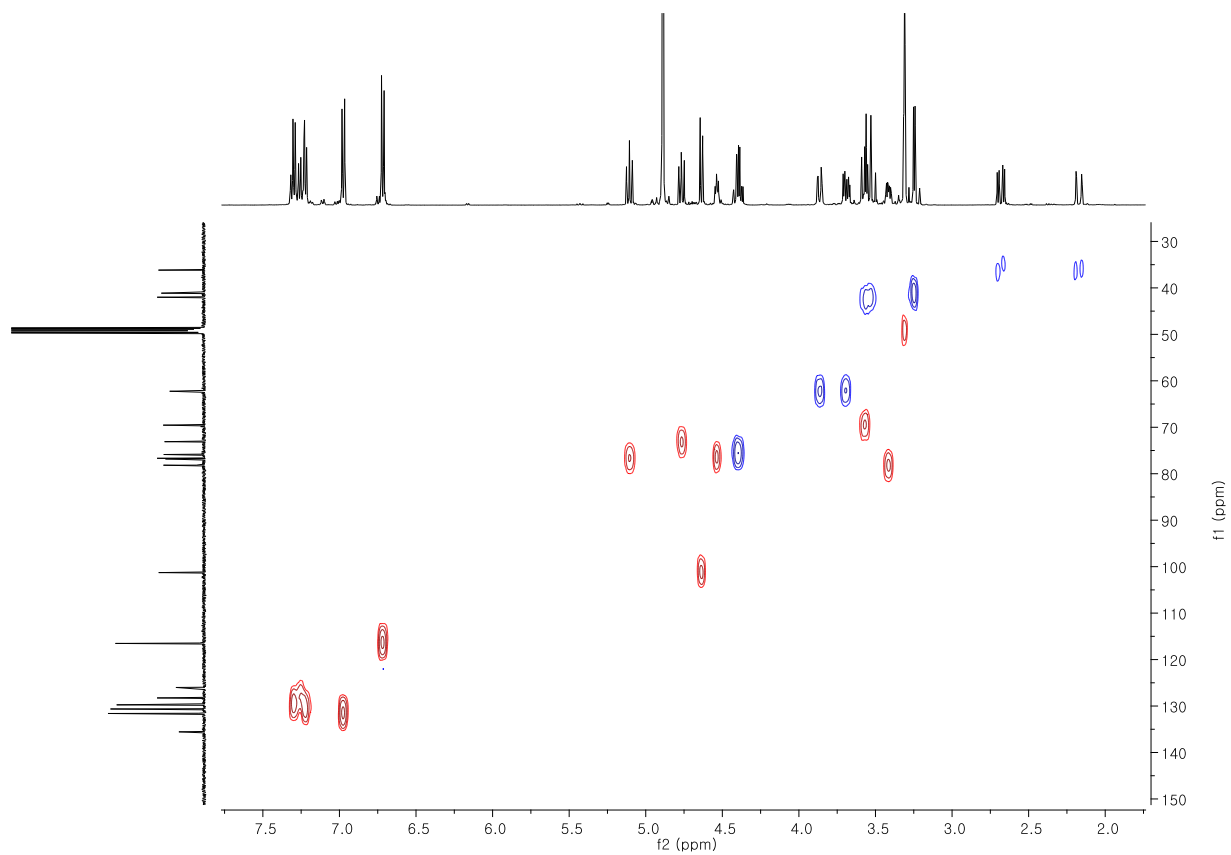


Fig. 12. HSQC spectrum of compound 2

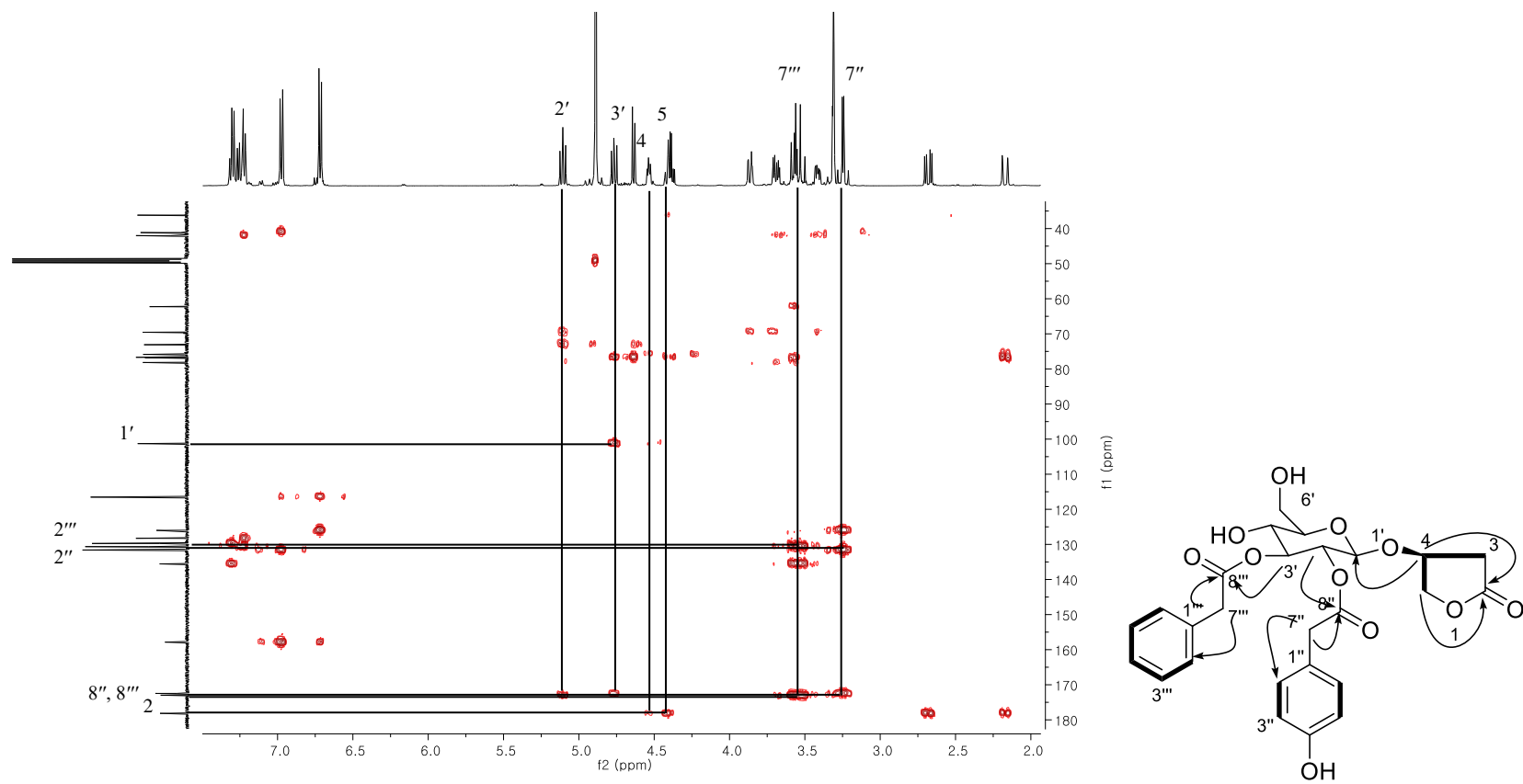


Fig. 13. HMBC spectrum of compound **2**

1.3 화합물 3의 구조

Taraxiroside C (**3**) 는 무색무정형 화합물이며 HRMS 값 [m/z 421.1125 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{18}H_{22}O_{10}Na$, 421.1111)]을 통해 분자식 $C_{18}H_{22}O_{10}$ 을 구하였다. 1H , ^{13}C NMR spectra에서 당 3번위치의 functional group이 없어진 것을 제외하고 화합물 **1**과 유사한 패턴을 갖는다. 1H , ^{13}C NMR spectra에서 통해 두 개의 carbonyl기 (δ_C 178.2, 173.1), 네 개의 aromatic carbon [δ_C/δ_H 157.7, 131.6/7.11 (2H, d, $J = 8.2$ Hz), 126.4, 116.4/6.75 (2H, d, $J = 8.2$ Hz)], 하나의 anomeric signal [δ_C/δ_H 101.6/4.52 (1H, d, $J = 8.2$ Hz)], 일곱 개의 oxygenated group [δ_C/δ_H 78.3/3.31 (1H, m), 76.5/4.50 (1H, t, $J = 6.0$ Hz), 76.0/3.54 (1H, t, $J = 9.2$ Hz), 75.9/4.41 (1H, t, $J = 10.0$ Hz), 4.37 (1H, d, $J = 10.0$ Hz), 75.2/4.69 (1H, t, $J = 8.6$ Hz), 71.5/4.35 (1H, t, $J = 9.2$ Hz), 62.6/3.87 (1H, d, $J = 12.1$ Hz), 3.67 (1H, dd, $J = 12.1, 5.4$ Hz)], 두 개의 methylene group [δ_C/δ_H 41.4/3.57 (2H, d, $J = 9.7$ Hz), 36.1/2.65 (1H, dd, $J = 18.0, 6.0$ Hz), 2.13 (1H, d, $J = 18.0$ Hz)]을 확인할 수 있다. Mosher's method를 통해 C-4를 R형으로 동정하였고, 화합물 **3**을 4*R*-O-[2-O-(4-hydroxyphenylacetyl)- β -D-glucopyranosyl]- γ -butyrolactone로 동정하였으며, taraxiroside C로 명명하였다.

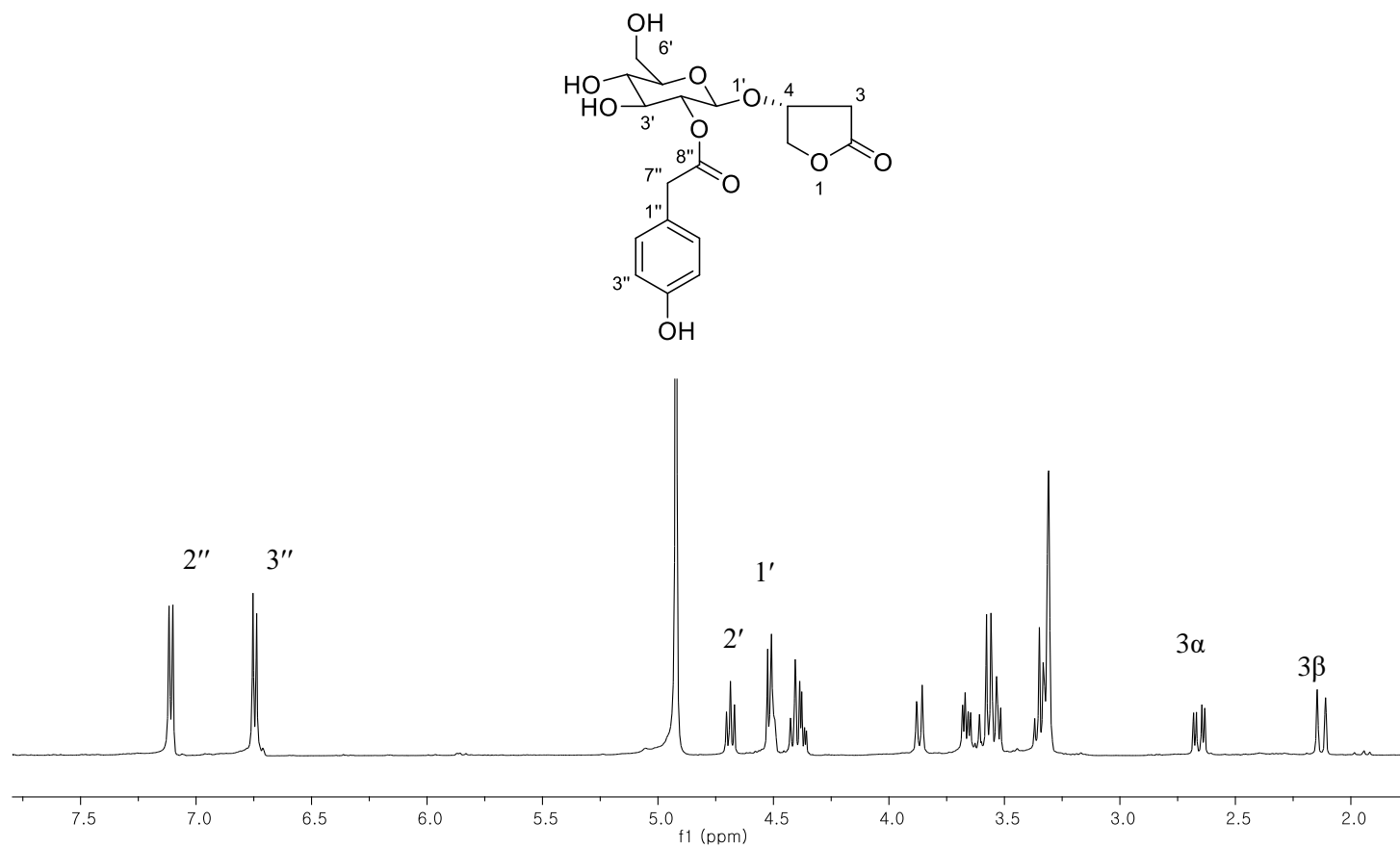


Fig. 14. ¹H-NMR spectrum of compound **3**

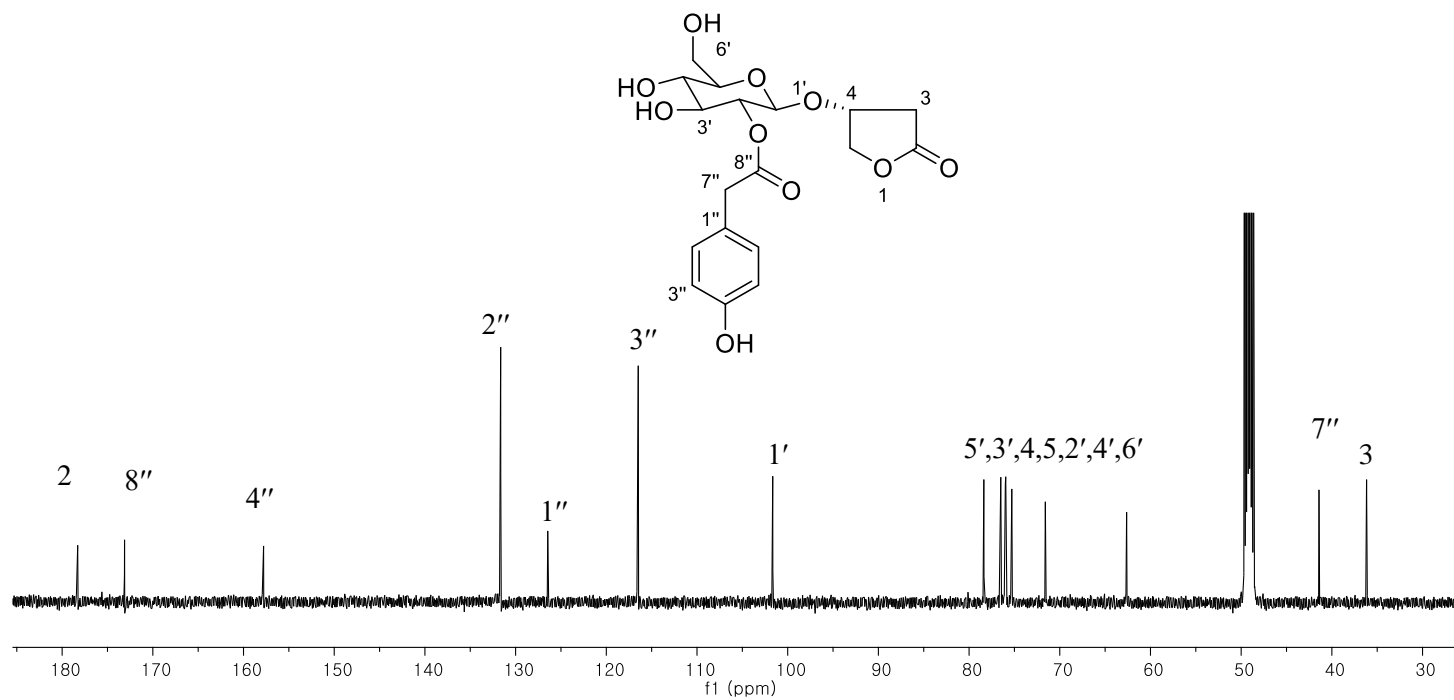


Fig. 15. ^{13}C -NMR spectrum of compound **3**

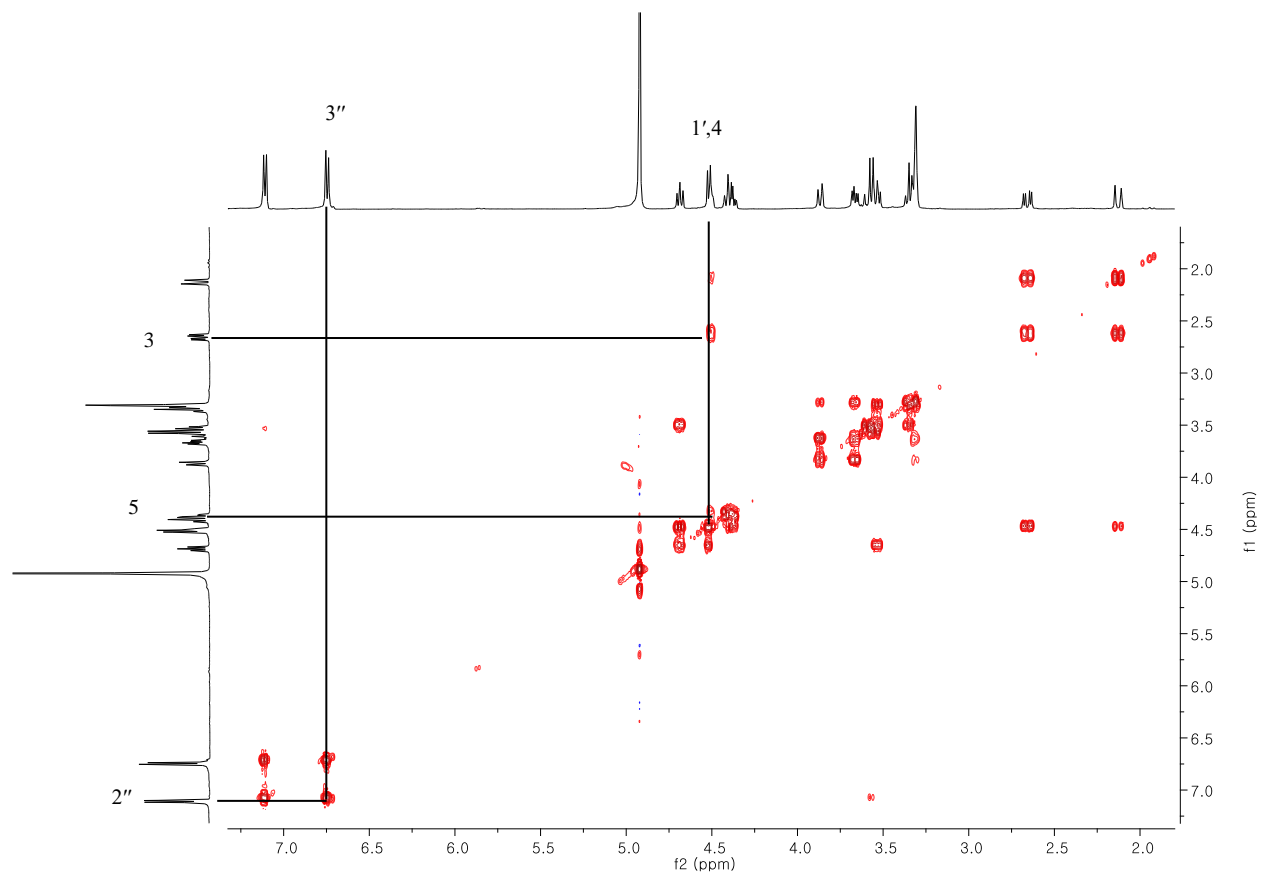


Fig. 16. ^1H - ^1H COSY spectrum of compound **3**

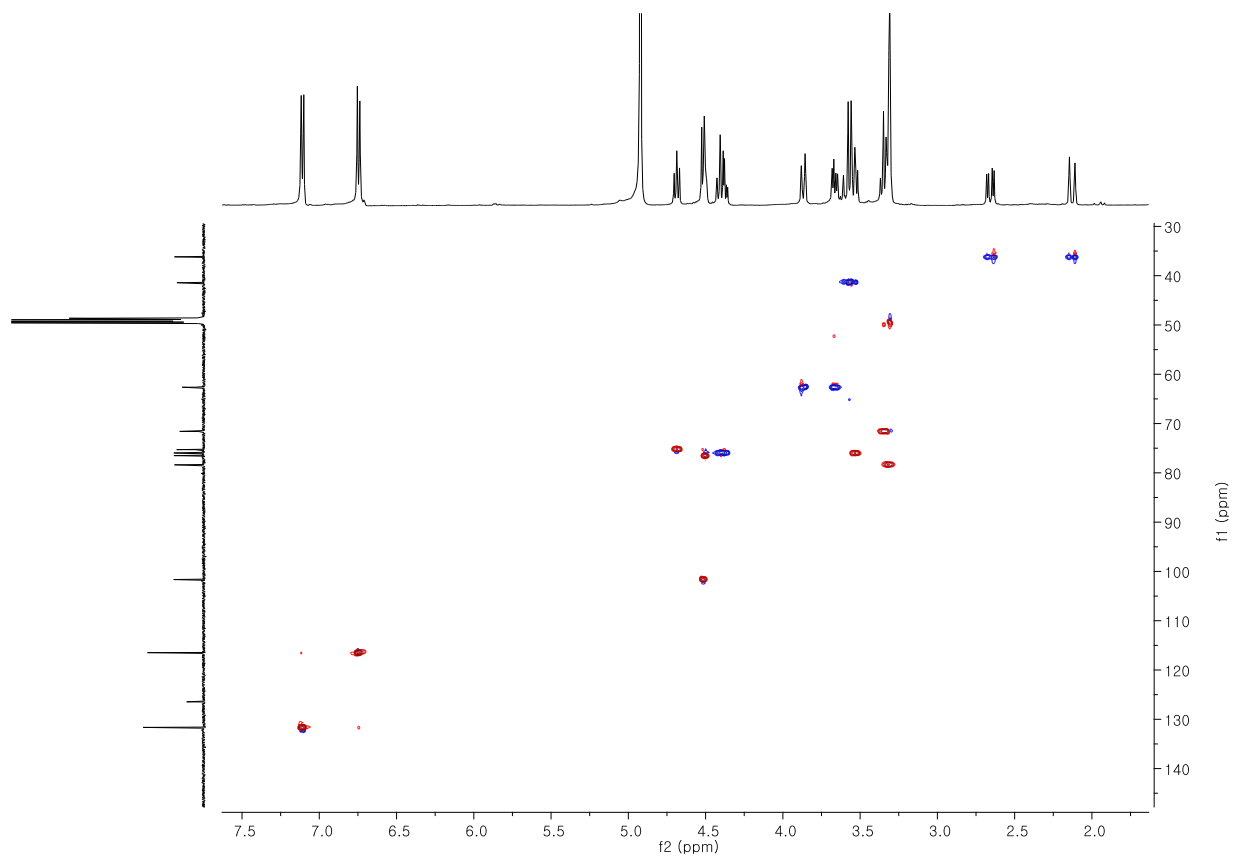


Fig. 17. HSQC spectrum of compound **3**

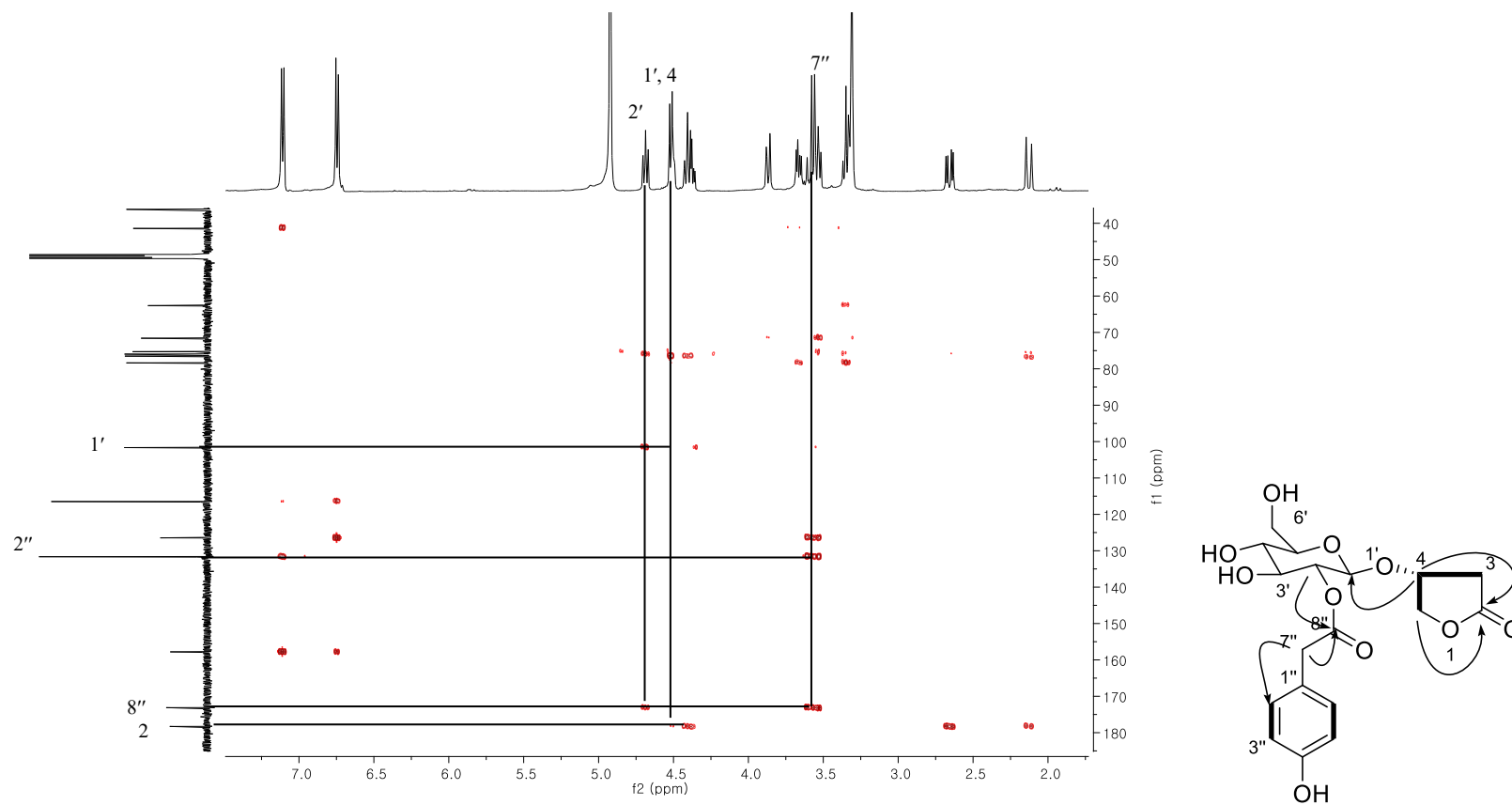


Fig. 18. HMBC spectrum of compound **3**

1.4 화합물 4의 구조

taraxiroside E (**4**)는 무색무정형 화합물로서 분자량 m/z 561.1598 $[M-H]^-$ (calcd. for $C_{27}H_{29}O_{13}$, 561.1608)을 통해 분자식 $C_{27}H_{30}O_{13}$ 을 구하였다. 1H , ^{13}C NMR 그리고 HSQC spectra를 통해 네 개의 ketone기 (δ_C 185.4, 173.2, 172.9, 164.7), 여덟 개의 aromatic carbon [δ_C/δ_H 166.1, 135.2, 134.1/7.77 (2H, d, J = 8.8 Hz), 130.7/7.24 (2H, m), 129.6/7.22 (2H, m), 125.1, 128.1/7.17 (1H, t, J = 7.6 Hz), 117.1/6.85 (2H, d, J = 8.8 Hz)], 하나의 anomeric signal [δ_C/δ_H 101.7/4.87 (1H, d, J = 8.0 Hz)], 일곱 개의 oxygenated group [δ_C/δ_H 79.1/4.16 (1H, dd, J = 8.1, 4.6 Hz), 78.0/4.16 (1H, m), 76.7/5.24 (1H, dd, J = 9.4, 9.6 Hz), 74.5/5.02 (1H, dd, J = 9.8, 8.0 Hz), 69.8/3.66 (1H, m), 65.4/3.65 (2H, m), 62.1/3.90 (1H, dd, J = 12.0, 2.2 Hz), 3.74 (1H, dd, J = 12.1, 5.2 Hz)], 한 개의 methoxyl기 [δ_C/δ_H 52.2/3.42 (3H, s)], 두 개의 methylene groups [δ_C/δ_H 41.9/3.71 (2H, s), 37.6/2.58 (1H, d, J = 4.6 Hz), 2.55 (1H, d, J = 8.1 Hz)]의 존재를 확인하였다. ^{13}C NMR signal δ_C 101.7, 78.0, 76.7, 74.5, 69.8, 62.1 과 anomeric proton의 J value를 통하여 β -glucose moiety를 동정하였고, 1H - 1H COSY (H-2/H-3, H-3/H-4), HMBC correlation (-OCH₃/C-1, H-2/C-1, H-2''/C-7'' , H-2'''/C-7''')을 통하여 부분구조 methyl-butanoate와 4-hydroxyphenylglyoxyl 기 및 phenylacetyl 기의 존재를 확인하였다. 또한 HMBC correlation (H-1'/C-3, H-2'/C-8, H-3'/C-8''')을 통하여 이들을 연결하였다. 절대구조를 밝히기 위하여 화합물 **4**를 산 가수분해를 한 뒤 Mosher's method를 실시하였고, C-3을 R형으로 동정하였다. 그 결과, 화합물 **4**를 methyl-3*R*-O-[2-O-(4-

hydroxyphenylglyoxyl)-3-*O*-(phenylacetyl)- β -D-glucopyranosyl]-butanoate 로

동정하였으며, taraxiroside D로 명명하였다.

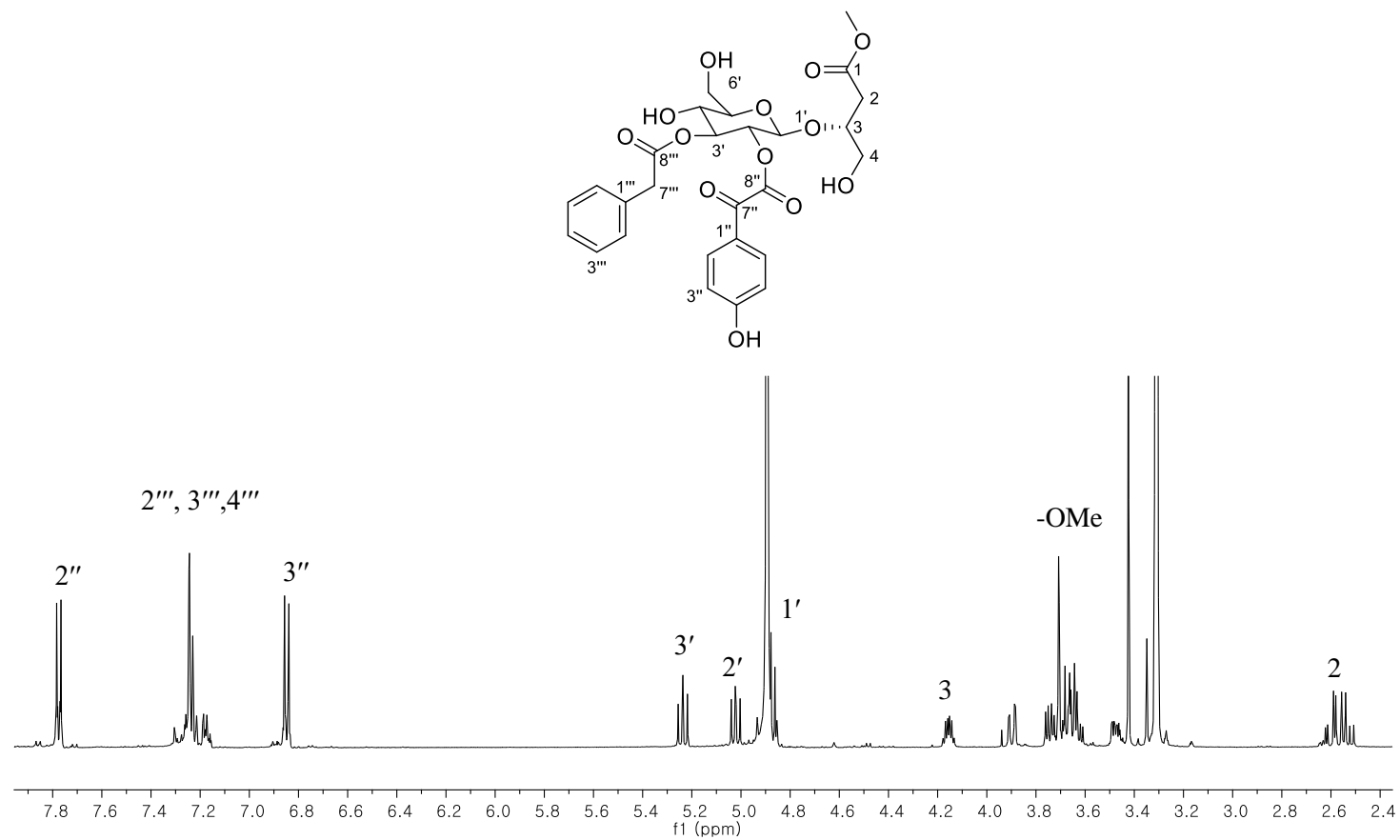


Fig. 19. ^1H -NMR spectrum of compound 4

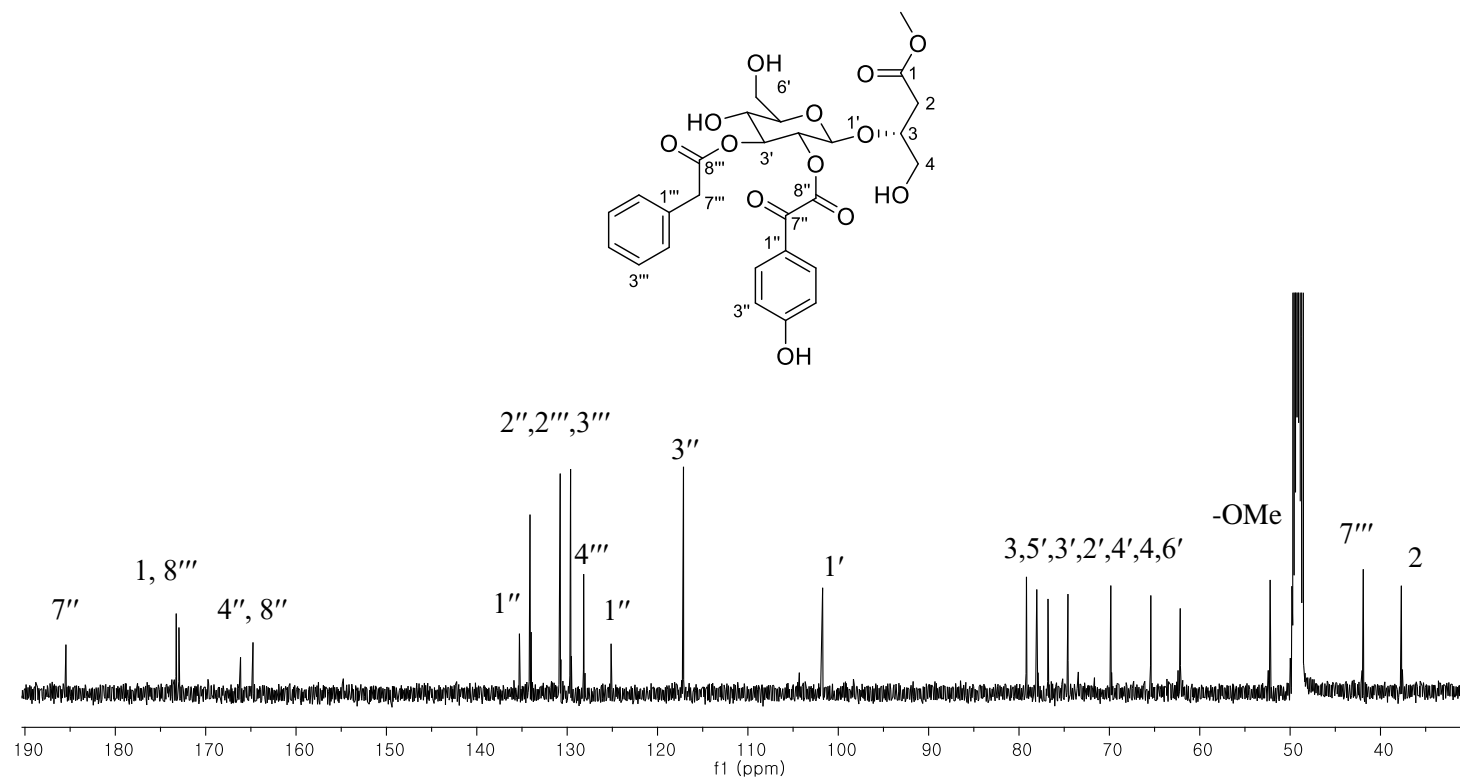


Fig. 20. ^{13}C -NMR spectrum of compound 4

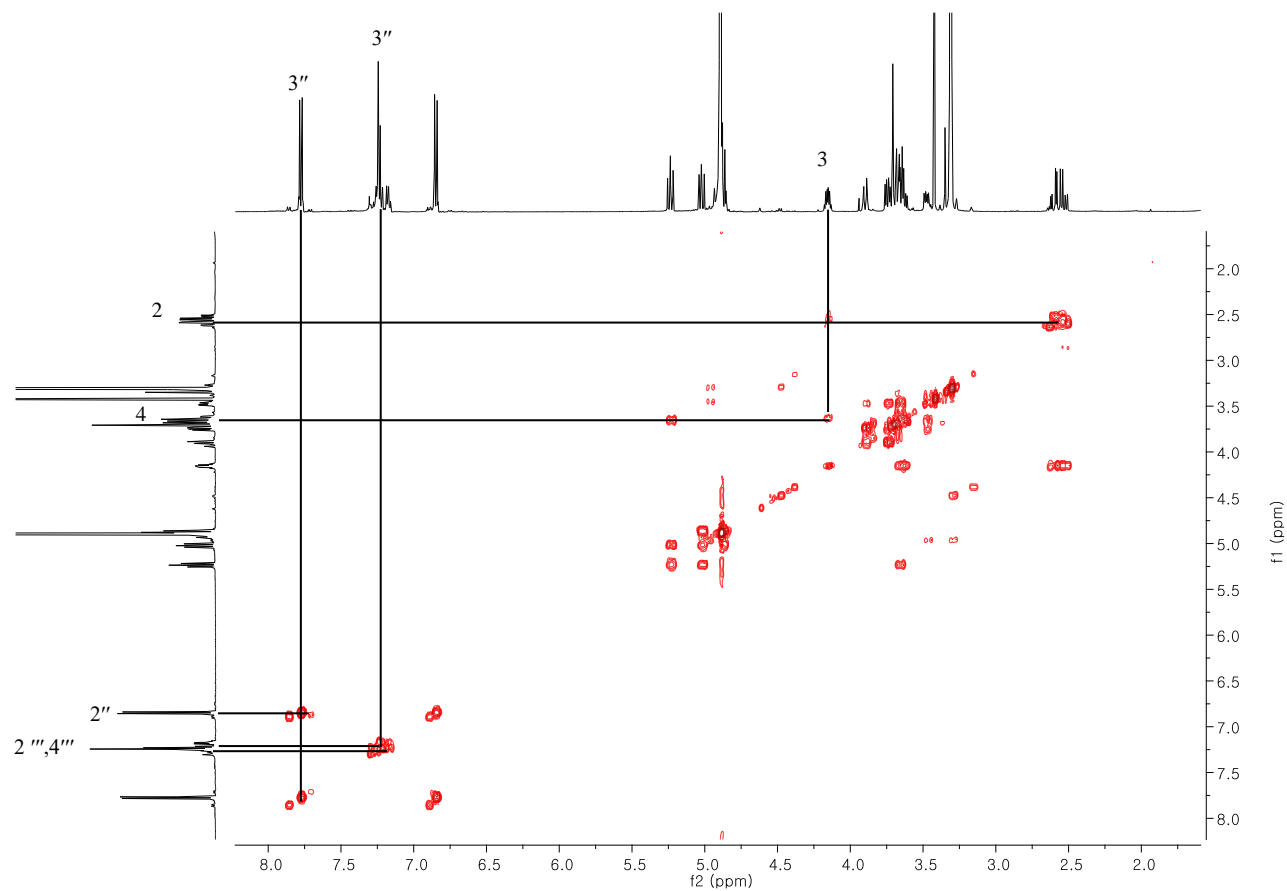


Fig. 21. ^1H - ^1H COSY spectrum of compound **4**

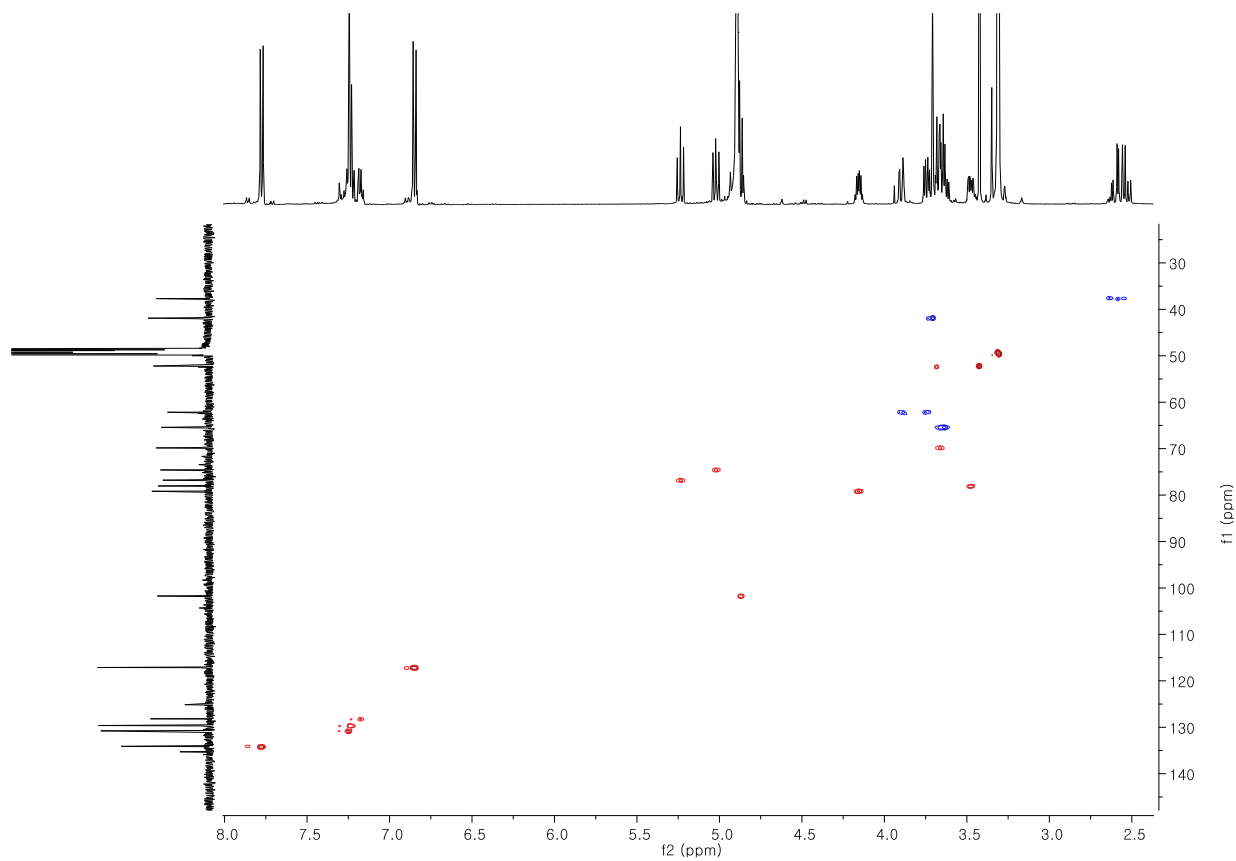


Fig. 22. HSQC spectrum of compound **4**

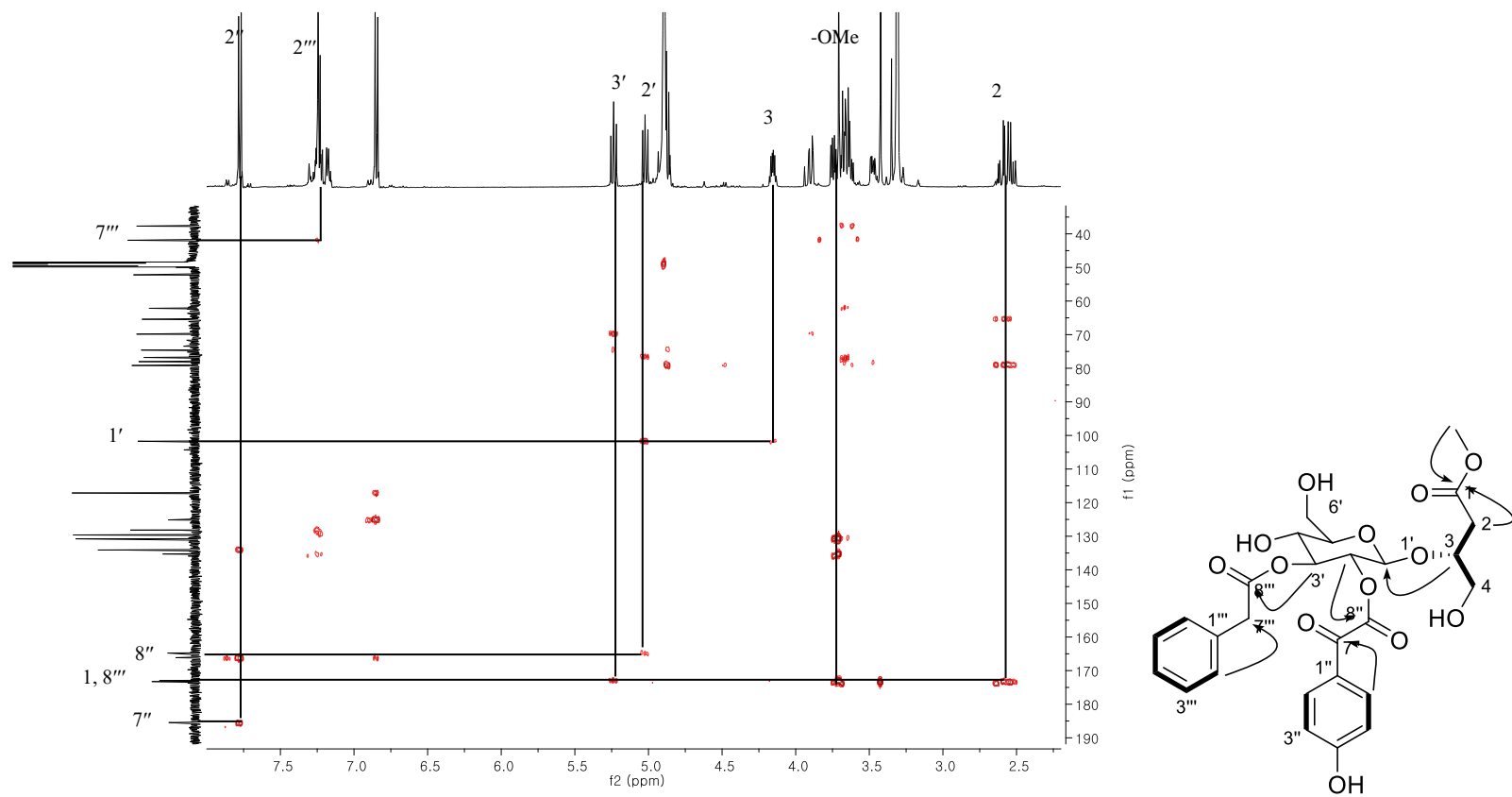


Fig. 23. HMBC spectrum of compound 4

1.5 화합물 5의 구조

화합물 5는 무색무정형 화합물로 HRESIMS 값 [m/z 593.1863 $[M+HCOO]^-$ (calcd. for $C_{28}H_{33}O_{14}$, 593.1870)]을 통해 분자식이 $C_{27}H_{32}O_{12}$ 인 화합물이다. 1H , ^{13}C NMR spectra를 통해 화합물 4와 유사한 구조를 갖고 있음을 알 수 있다. 가장 큰 변화는 C-7''의 carbonyl기가 없어짐으로써 4-hydroxyphenylacetyl기로 대체되었다는 점이다. 1H , ^{13}C NMR spectra에서 세 개의 carbonyl기 (δ_C 173.2, 172.9, 172.7), 여덟 개의 aromatic carbon [δ_C/δ_H 157.8, 135.4, 131.7/6.99 (2H, d, J = 8.8 Hz), 130.6/7.18 (2H, d, J = 8.3 Hz), 129.6/7.28 (2H, t, J = 6.3 Hz), 128.1/7.28 (1H, d, J = 7.2 Hz), 126.0, 116.4/6.70 (2H, d, J = 8.8 Hz)], 하나의 anomeric signal [δ_C/δ_H 102.1/4.69 (1H, d, J = 8.0 Hz)], 일곱 개의 oxygenated group [δ_C/δ_H 79.7/4.07 (1H, dd, J = 8.3, 4.8 Hz), 77.8/3.42 (1H, m), 77.0/5.09 (1H, t, J = 9.5 Hz), 73.3/4.75 (1H, dd, J = 9.7, 8.0 Hz), 69.6/3.56 (1H, m), 65.2/3.58 (2H, d, J = 4.8 Hz), 62.2/3.83 (1H, dd, J = 12.0, 2.3 Hz), 3.70 (1H, dd, J = 11.0, 4.1 Hz)], 한 개의 methoxyl기 [δ_C/δ_H 52.3/3.67 (3H, s)], 세 개의 methylene group [δ_C/δ_H 41.8/3.52 (1H, d, J = 14.8 Hz), 3.43 (1H, m), 41.0/3.59 (1H, d, J = 4.9 Hz), 3.32 (1H, m), 37.7/2.50 (1H, dd, J = 16.2, 4.8 Hz), 2.36 (1H, dd, J = 16.2, 8.3 Hz)]을 확인할 수 있다. HMBC correlation (H-2''/ C-7'')를 통해 4-hydroxyphenylacetyl기가 당 2번 위치에 연결되어 있는 것을 확인할 수 있다. 화합물 4와 같이 Mosher's method를 사용하였으며 C-3의 절대구조를 R형으로 동정하였다. 이것으로 화합물 5를 methyl-3*R*-O-[2-*O*-(4-hydroxyphenylacetyl)-3-*O*-(phenylacetyl)- β -D-

glucopyranosyl]-butanoate로 동정하였으며, taraxiroside E라 명명하였다.

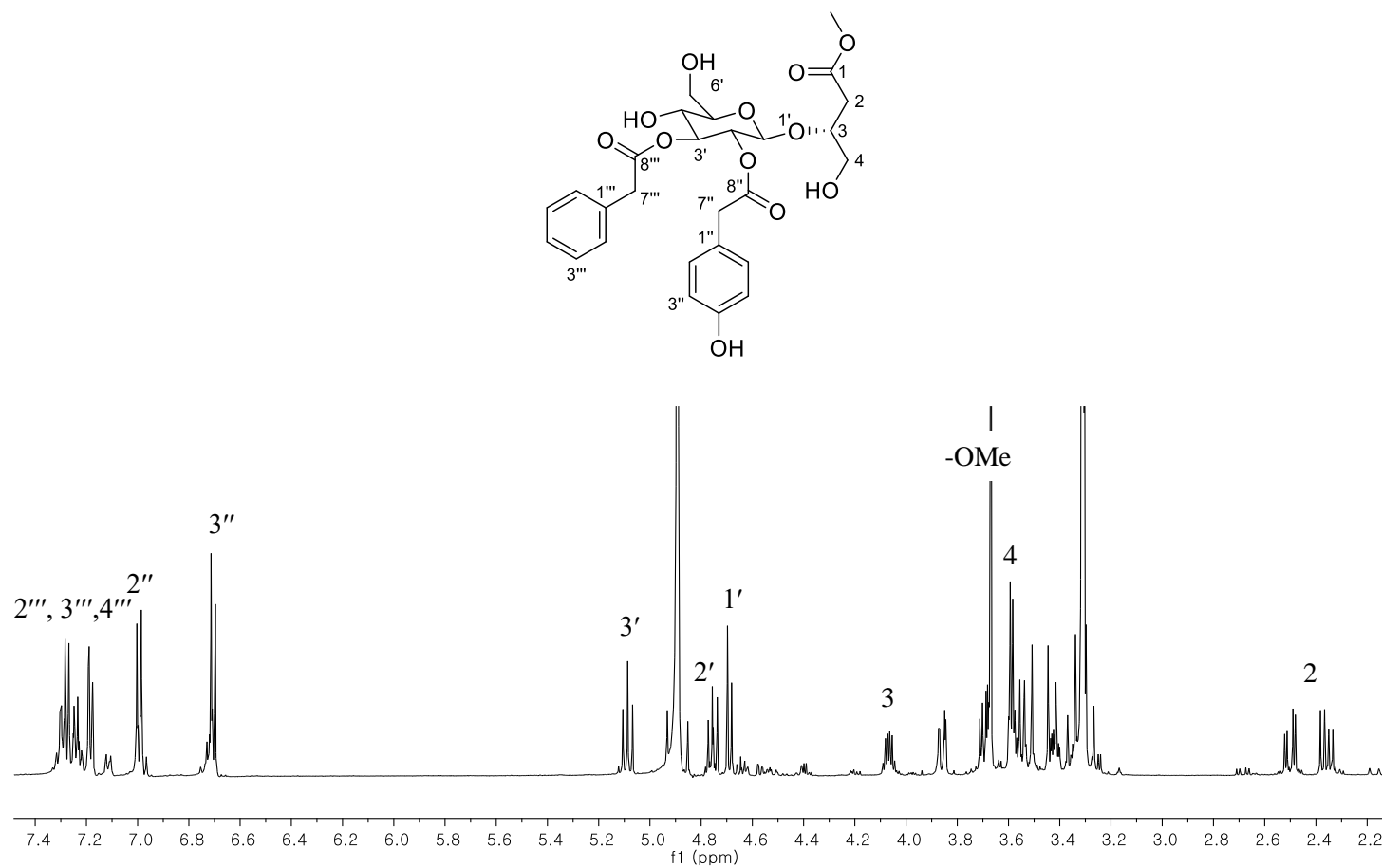


Fig. 24. ^1H -NMR spectrum of compound **5**

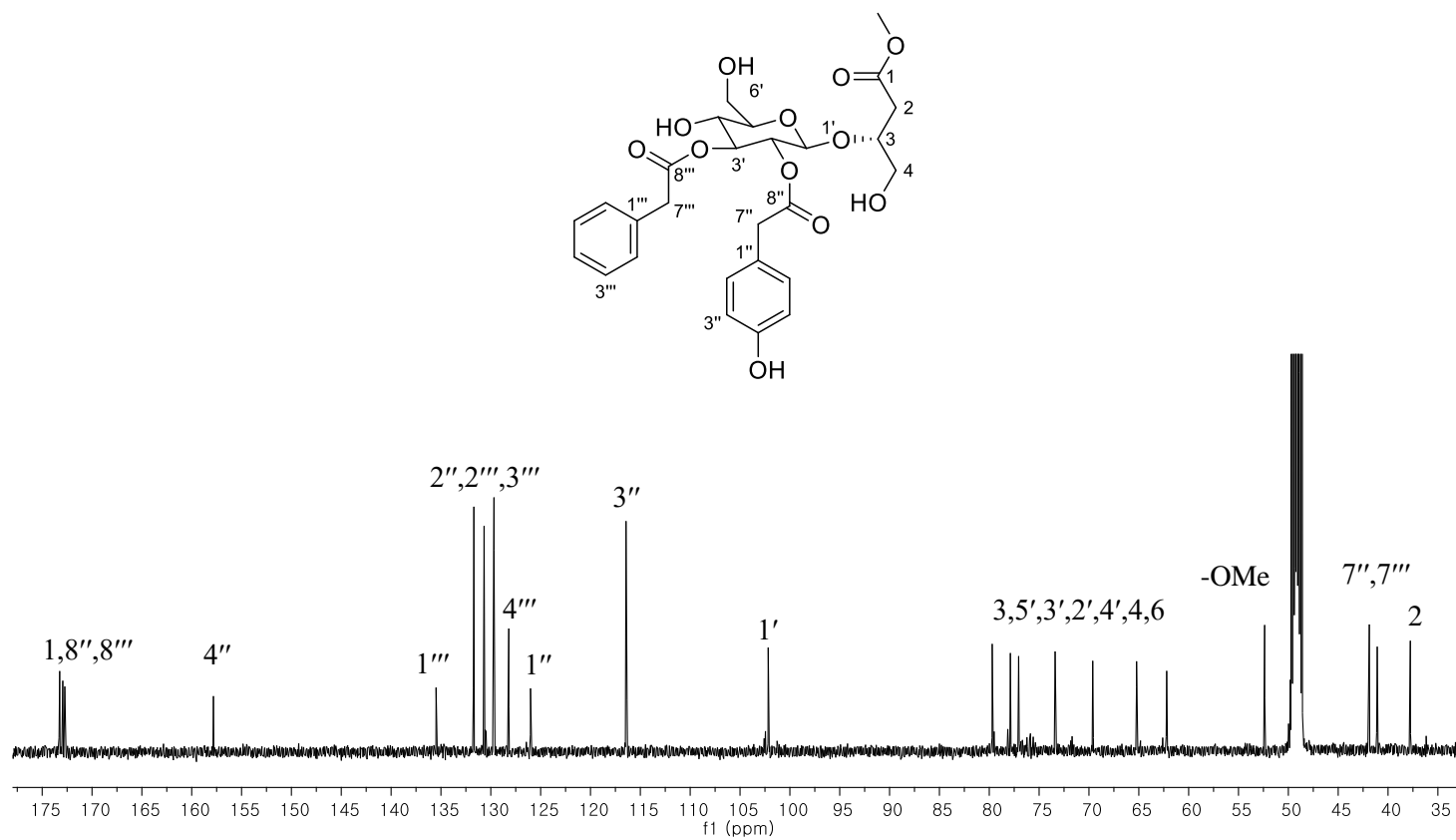


Fig. 25. ^{13}C -NMR spectrum of compound 5

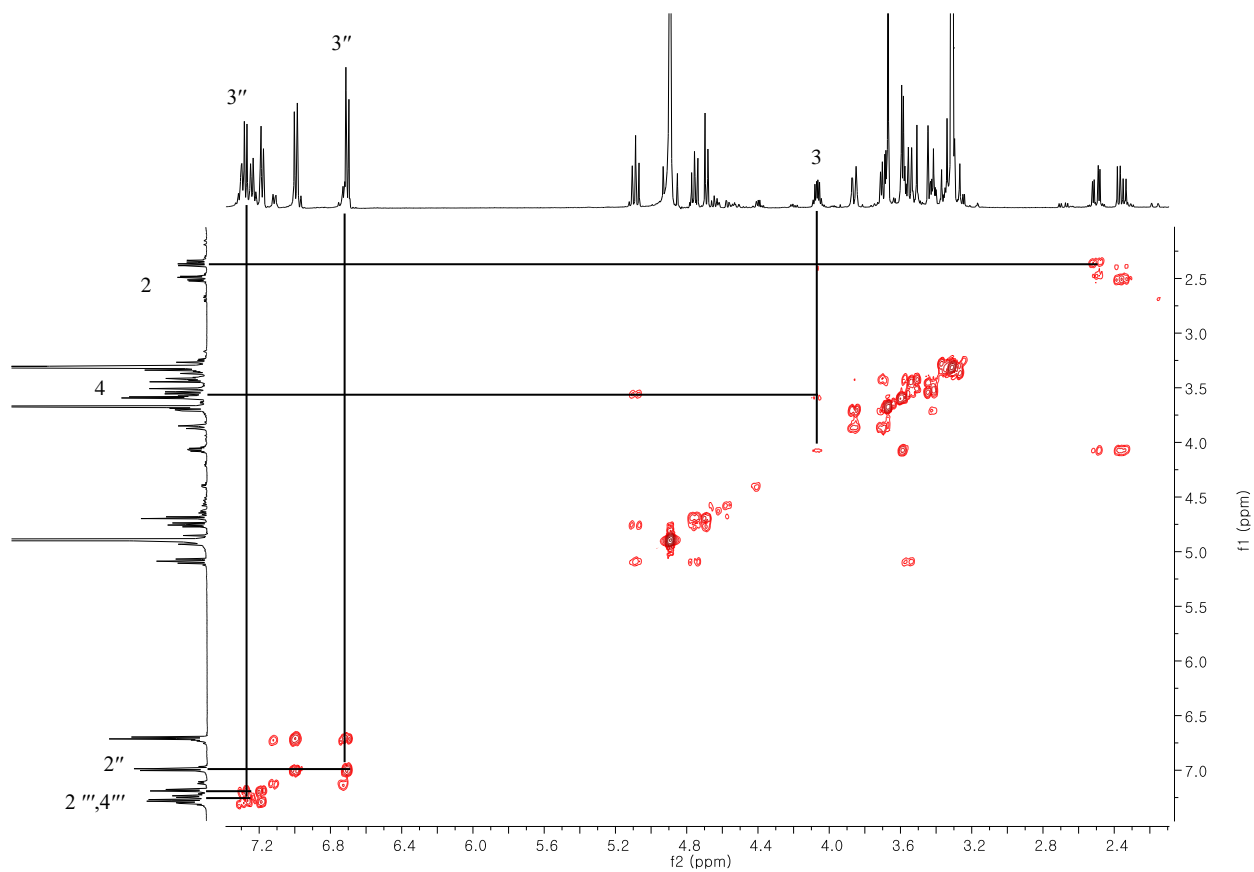


Fig. 26. ^1H - ^1H COSY spectrum of compound **5**

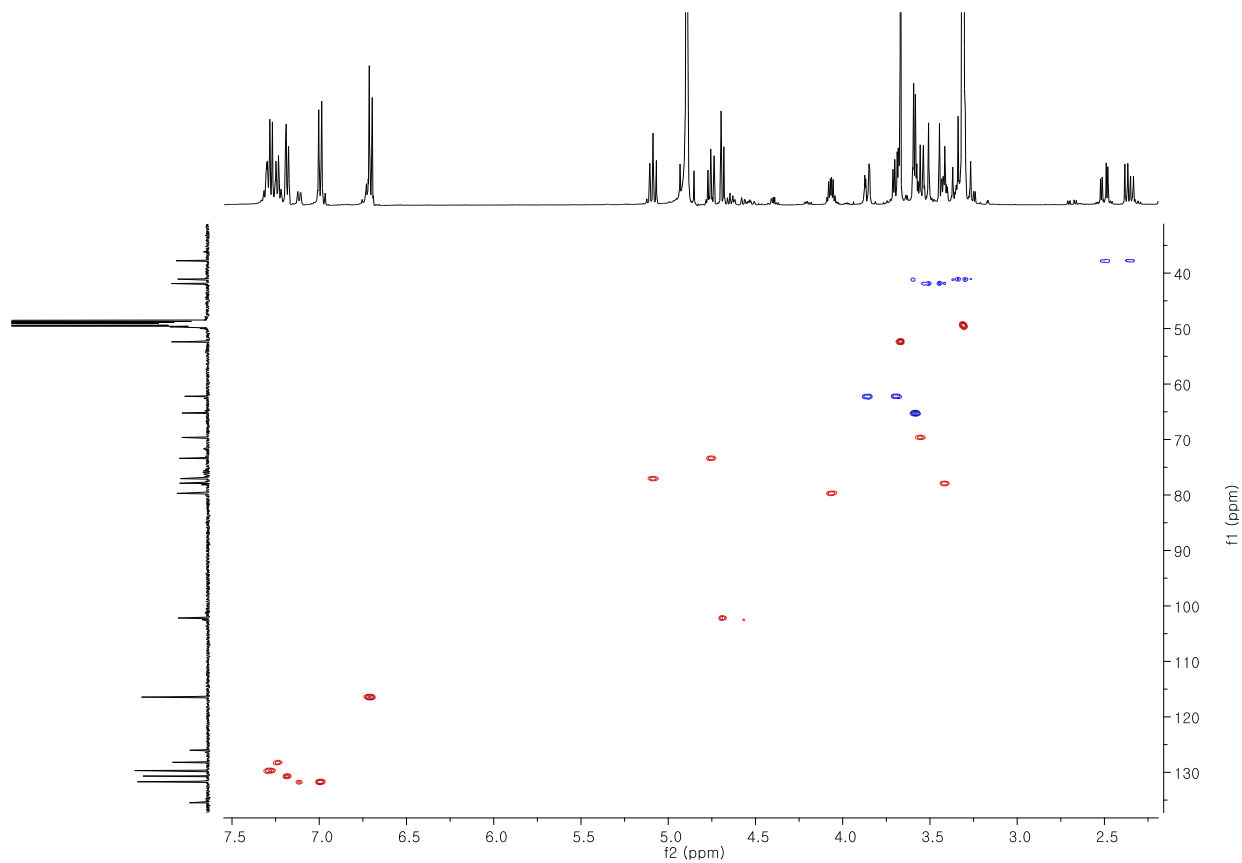


Fig. 27. HSQC spectrum of compound **5**

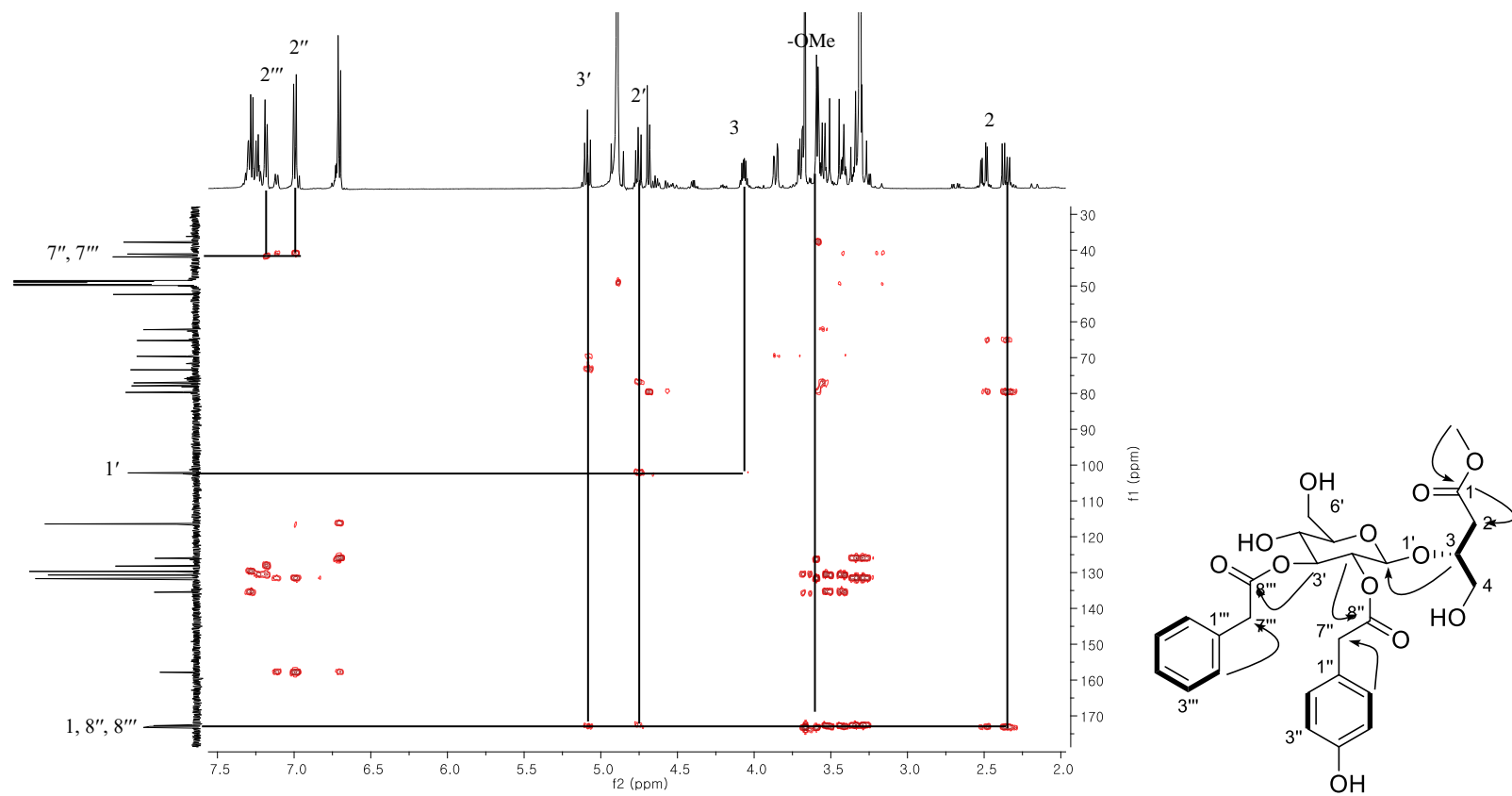


Fig. 28. HMBC spectrum of compound 5

1.6 화합물 6의 구조

화합물 6은 무색무정형 화합물로 분자식이 $C_{19}H_{26}O_{11}$ 인 화합물이다 [m/z 453.1392 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{27}H_{32}O_{12}Na$, 453.1373)]. 1H , ^{13}C NMR spectra를 통하여 당 3번위치의 functional group이 없어진 것을 제외하고 화합물 5와 같다는 것을 확인할 수 있다. 1H , ^{13}C NMR spectra에서 두 개의 carbonyl기 (δ_C 173.2, 173.2), 네 개의 aromatic carbon [δ_C/δ_H 157.6, 131.7/7.12 (2H, d, $J = 8.3$ Hz), 126.4, 116.3/6.72 (2H, d, $J = 8.3$ Hz)], 하나의 anomeric signal [δ_C/δ_H 102.4/4.57 (1H, d, $J = 8.0$ Hz)], 일곱 개의 oxygenated group [δ_C/δ_H 79.5/4.04 (1H, dd, $J = 8.1, 4.8$ Hz), 65.2/3.57 (2H, d, $J = 4.8$ Hz), 75.5/4.68 (1H, t, $J = 9.0$ Hz), 76.1/3.52 (1H, t, $J = 9.0$ Hz), 71.6/3.37 (1H, t, $J = 9.0$ Hz), 78.0/4.16 (1H, m), 62.5/3.87 (1H, d, $J = 12.0$ Hz), 3.68 (1H, m)], 한 개의 methoxyl기 [δ_C/δ_H 52.4/3.67 (3H, s)], 두 개의 methylene group [δ_C/δ_H 41.1/3.60 (2H, s), 41.0/3.59 (1H, d, $J = 4.9$ Hz), 37.7/2.48 (1H, dd, $J = 16.3, 5.0$ Hz)]을 확인할 수 있다. HMBC correlation (H-3/C-1', H-2'/C-8'')를 통하여 butanoate는 당 anomeric 위치에, phenylacetyl기는 당 2번 위치에 연결되어 있음을 알 수 있다. Mosher's method를 통해 C-3이 R형임을 동정할 수 있었고, 이에 따라 화합물 6을 methyl-3*R*-O-[2-*O*-(4-hydroxyphenylacetyl)- β -D-glucopyranosyl]-butanoate, taraxiroside F로 명명하였다.

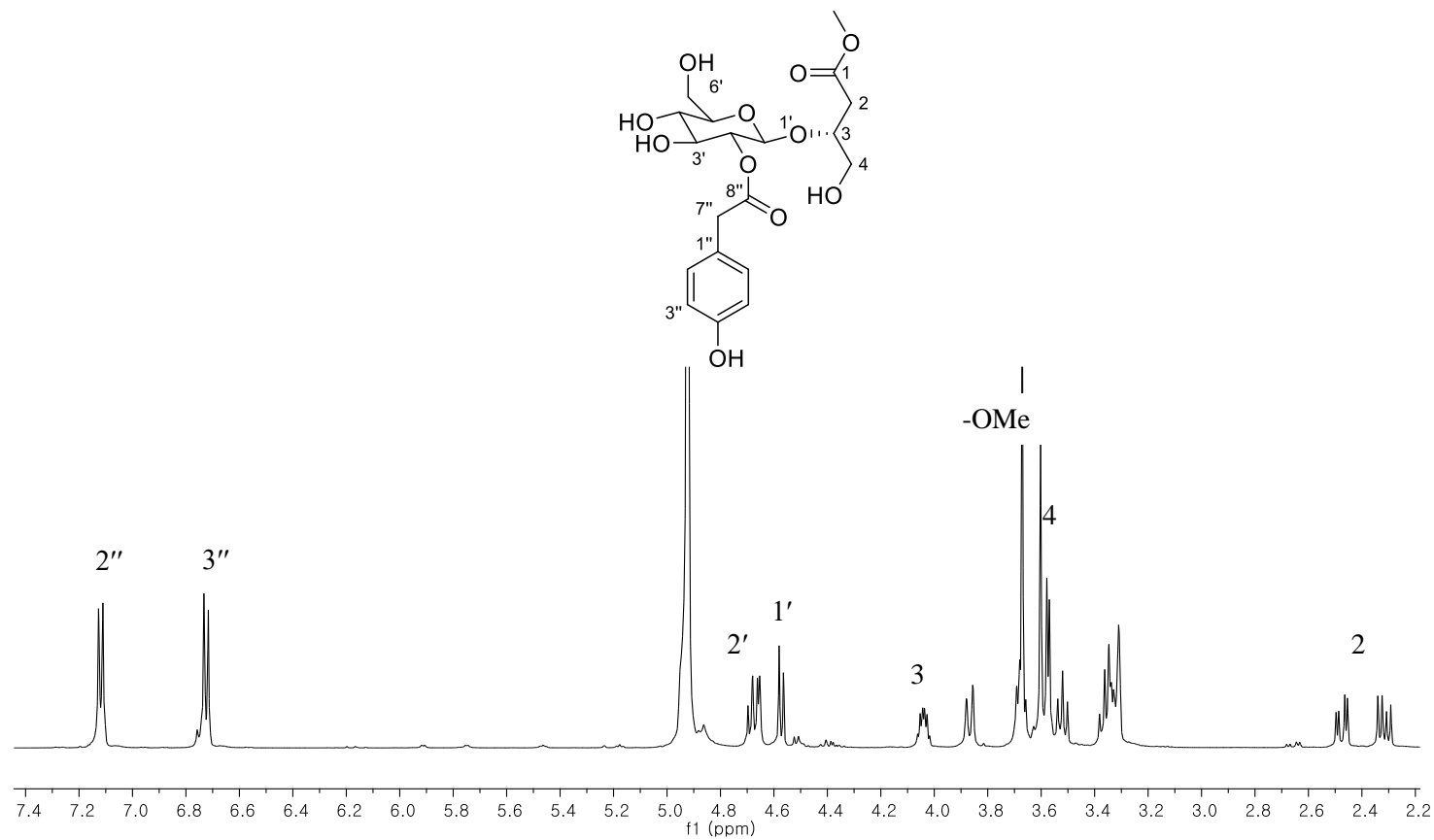


Fig. 29. ^1H -NMR spectrum of compound **6**

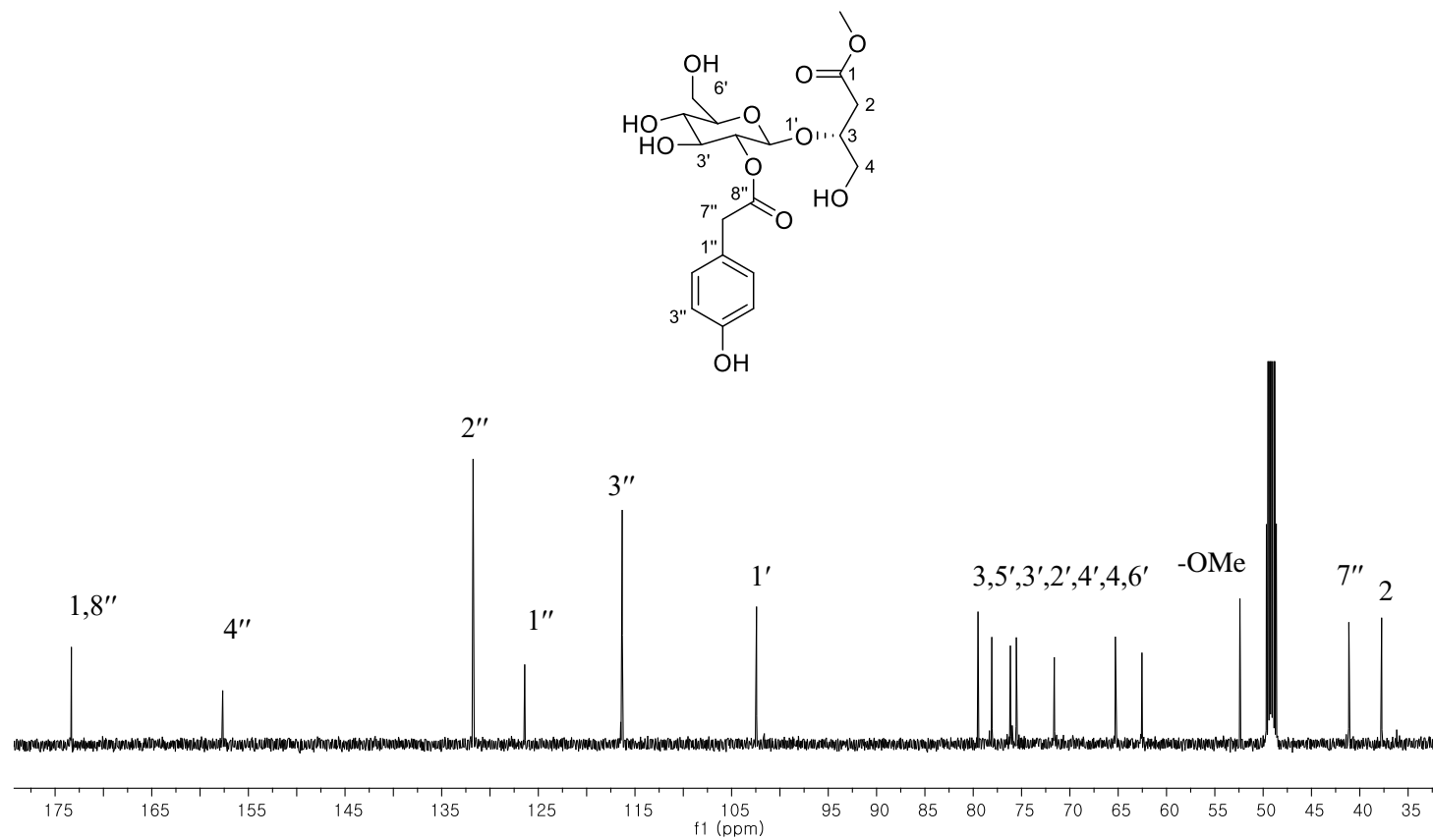


Fig. 30. ^{13}C -NMR spectrum of compound 6

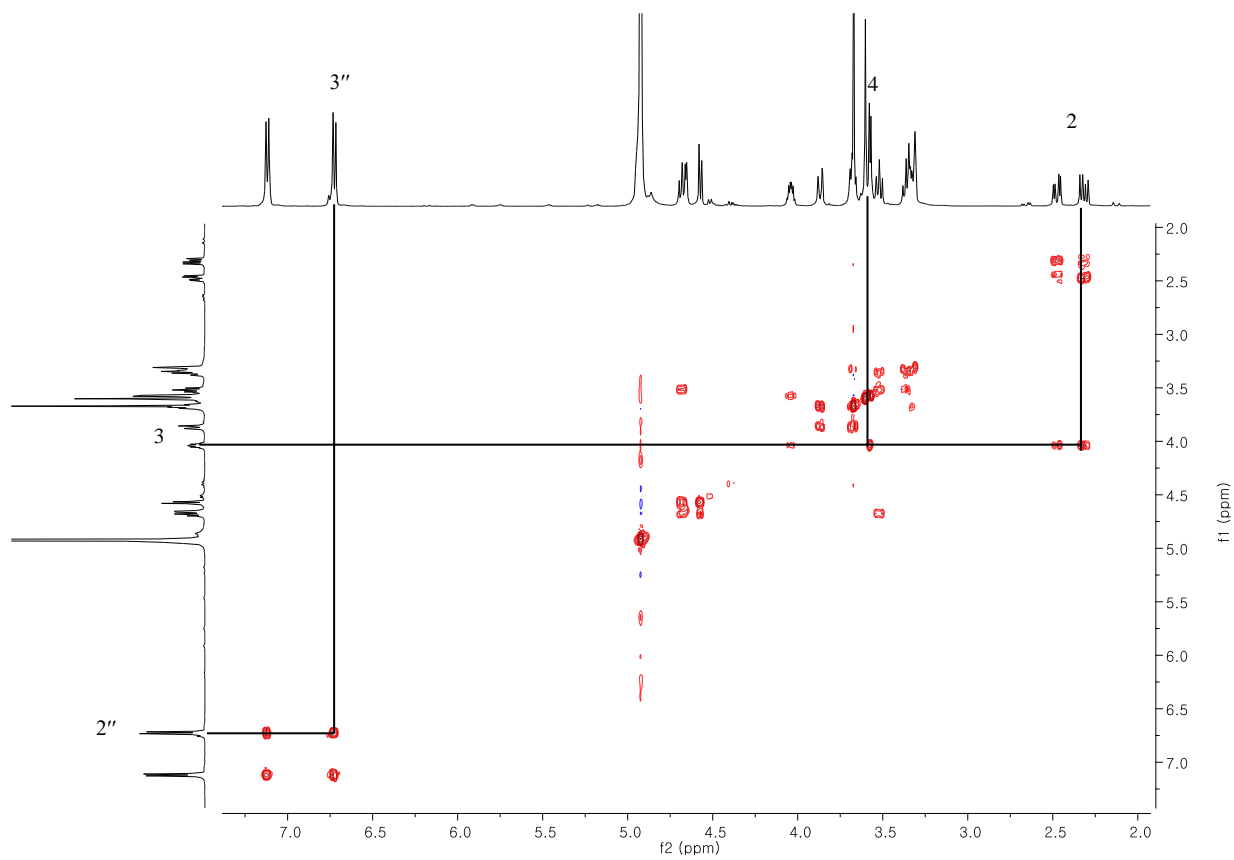


Fig. 31. ^1H - ^1H COSY spectrum of compound **6**

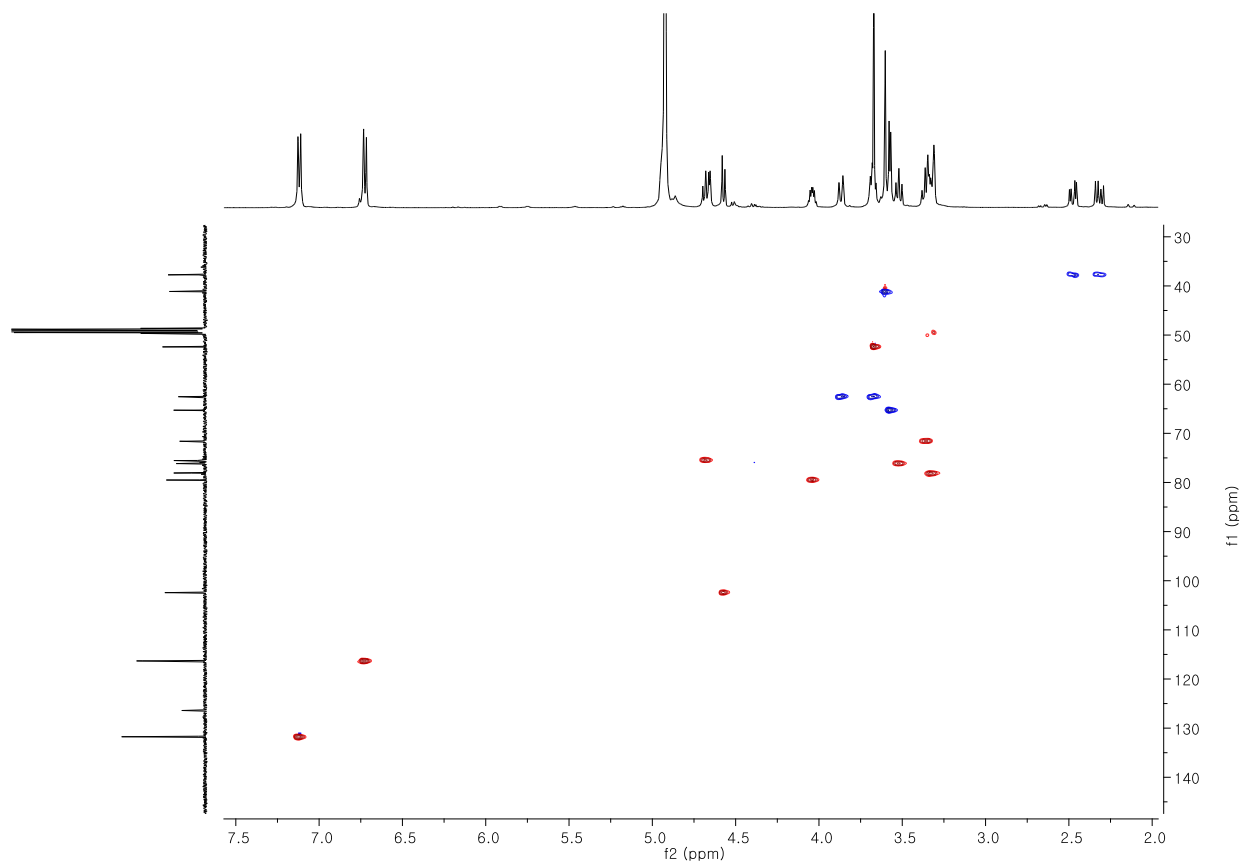


Fig. 32. HSQC spectrum of compound **6**

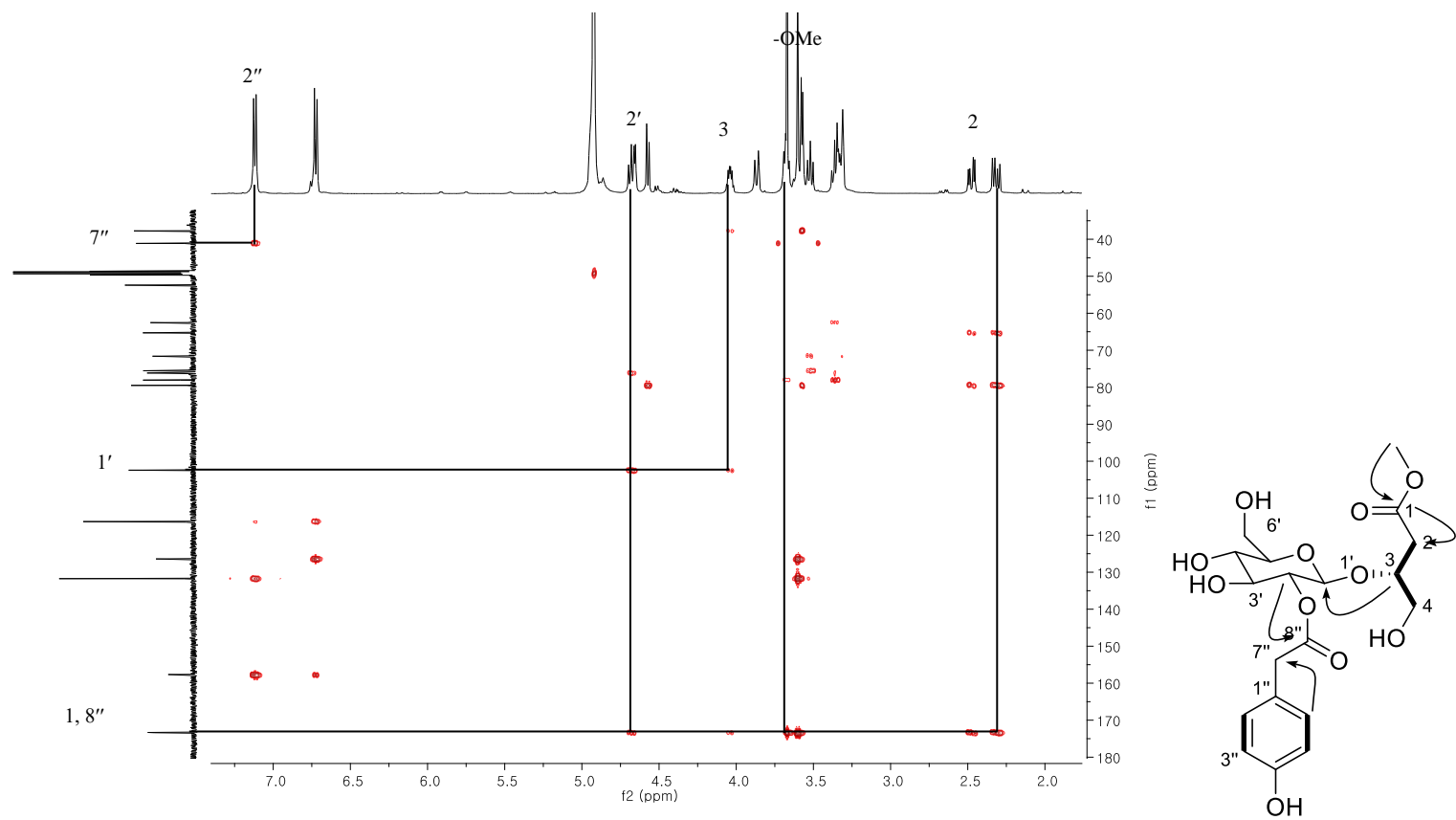


Fig. 33. HMBC spectrum of compound **6**

1.7 화합물 7의 구조

화합물 7은 무색무정형 화합물로서 분자식이 $C_{22}H_{24}O_{10}$ 이다 [m/z 471.1281 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{22}H_{24}O_{10}Na$, 471.1267)]. 1H NMR spectrum에서 δ_H 7.10, 6.74, 7.00, 6.70 피크를 통해 두 개의 1,4-치환체를, δ_H 3.48, 3.36 를 통해 두 개의 methylene기를, δ_H 5.27, 5.07, 3.81, 3.63, 3.52을 통해 하나의 cyclohexane의 존재를 추정할 수 있다. ^{13}C NMR spectrum에서 두 개의 aromatic 링 (δ_C 157.8, 157.6, 131.7, 131.5, 126.3, 126.2, 116.5, 116.3), 두 개의 carbonyl기 (δ_C 173.5, 172.6), 여섯 개의 oxygenated carbon (δ_C 74.4, 73.7, 72.7, 72.5, 72.4, 71.0) 과 두 개의 methylene 피크(δ_C 41.4, 40.9)을 확인하였다. 2D NMR spectra를 통해 두 개의 4-hydroxyphenylacetyl기가 inositol에 연결되어 있는 1차구조를 추정할 수 있다. Down-shift 된 1번, 2번 proton 과 HMBC correlation (H-1/C-8', H-2/C-8'')을 통해 연결고리를 동정하였다.

Inositol의 입체구조는 coupling constant를 통해 구할 수 있는데 (Liu et al., 2014), 세 쌍의 *trans*-diaxial proton (H-2/H-3, H-3/H-4, H-4/H-5)은 J value 가 9–10 Hz, 두 쌍의 equatorial-axial proton 그리고 한 쌍의 equatorial proton은 J value 가 4 Hz 이하이다. 그러므로 H-2, H-3, H-4, H-5 은 axial, 나머지 H-1, H-6은 equatorial 형태임을 추정할 수 있다.

더 정확한 입체구조를 동정하기 위하여 화합물 7을 산 가수분해하여 inositol만 분리한 뒤, 표준품의 1H NMR spectrum과 비교를 하였다 (Table3). 그 결과 *chiro*-inositol임을 알 수 있었고, 선광도 값 $[[\alpha]_D^{20} +53.1$ (c 0.05, H_2O)] 을 통해 *D-chiro* inositol로 동정하였다 (Ribeiro et al., 2013).

결론적으로, 화합물 **7**을 1D-1,2-di-*O*-4-hydroxyphenylacetyl-*chiro*-inositol 로 동정하였다.

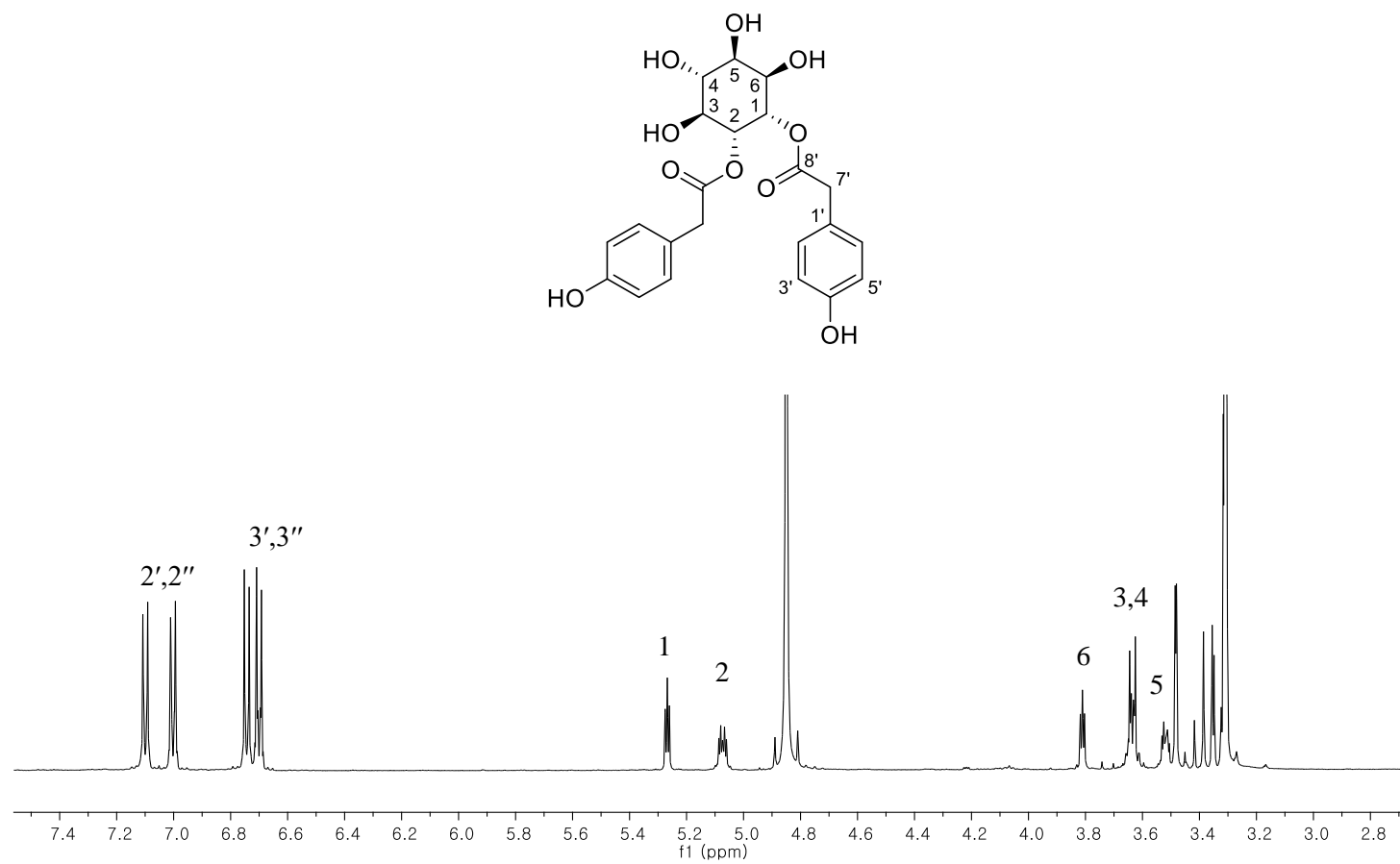


Fig. 34. ^1H -NMR spectrum of compound 7

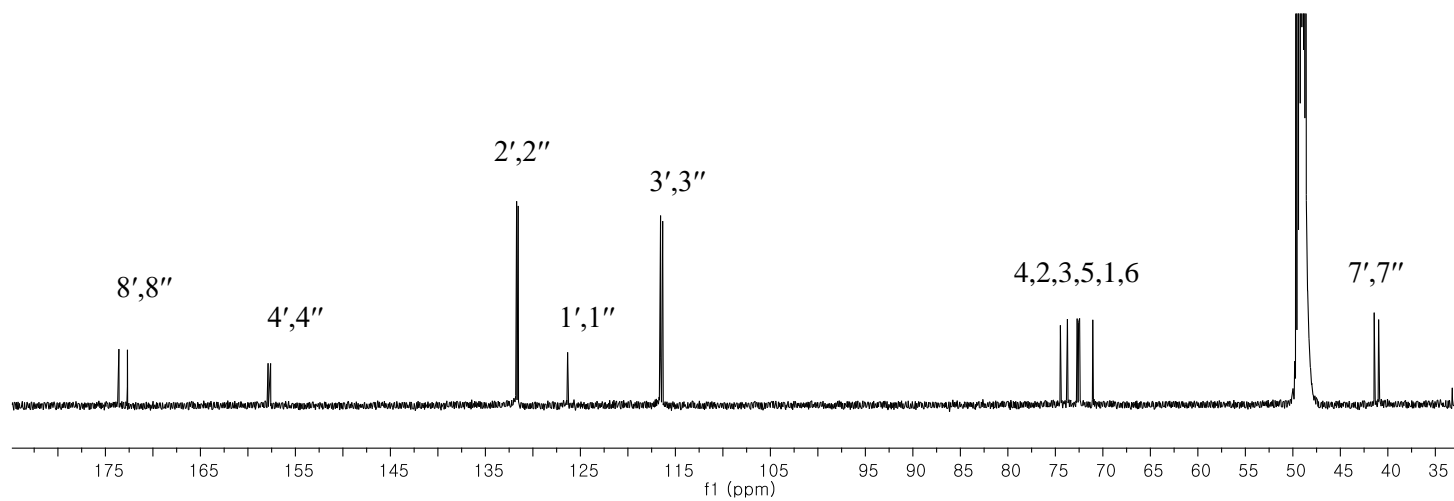
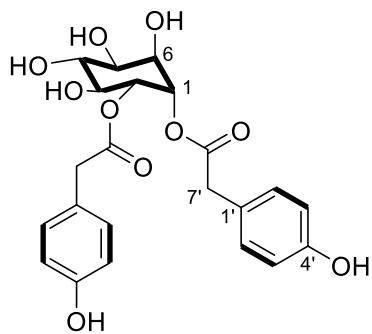


Fig. 35. ^{13}C -NMR spectrum of compound 7

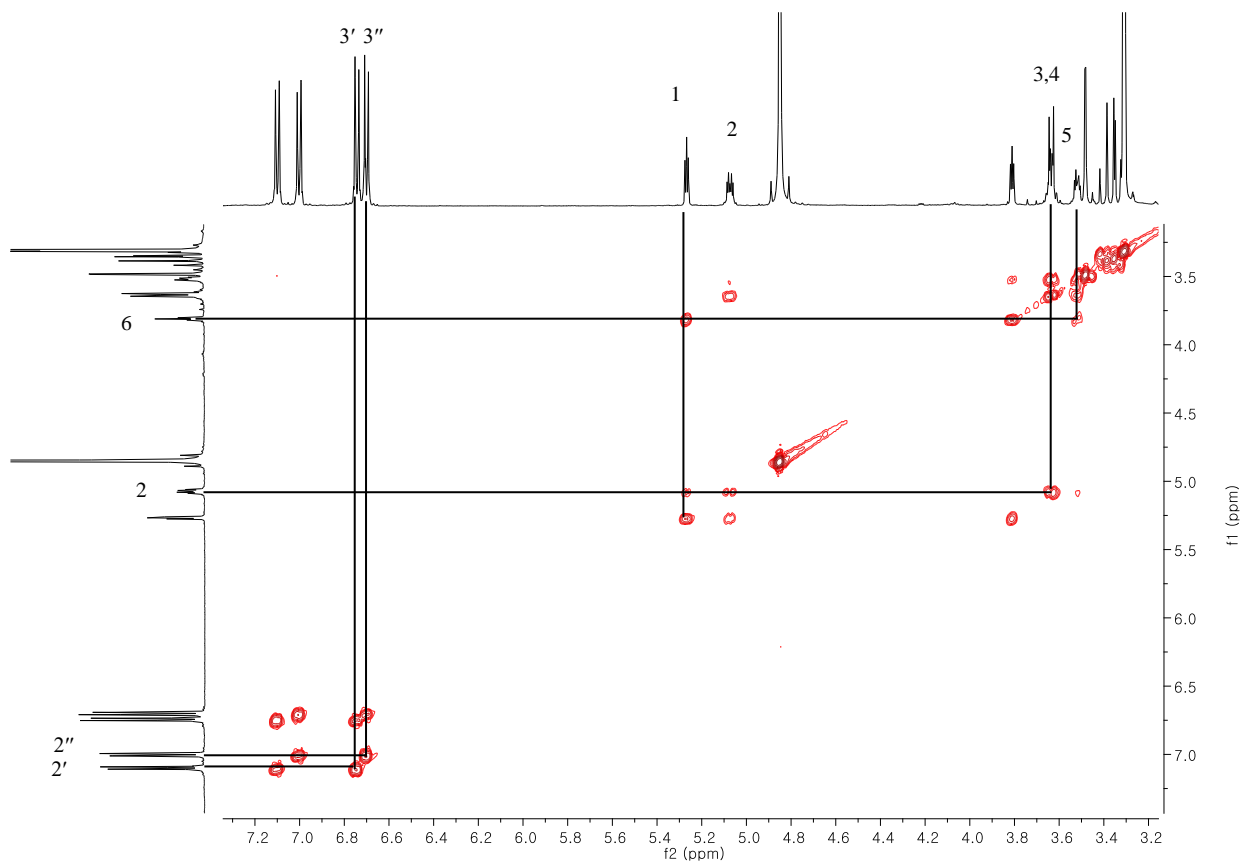


Fig. 36. ^1H - ^1H COSY spectrum of compound **7**

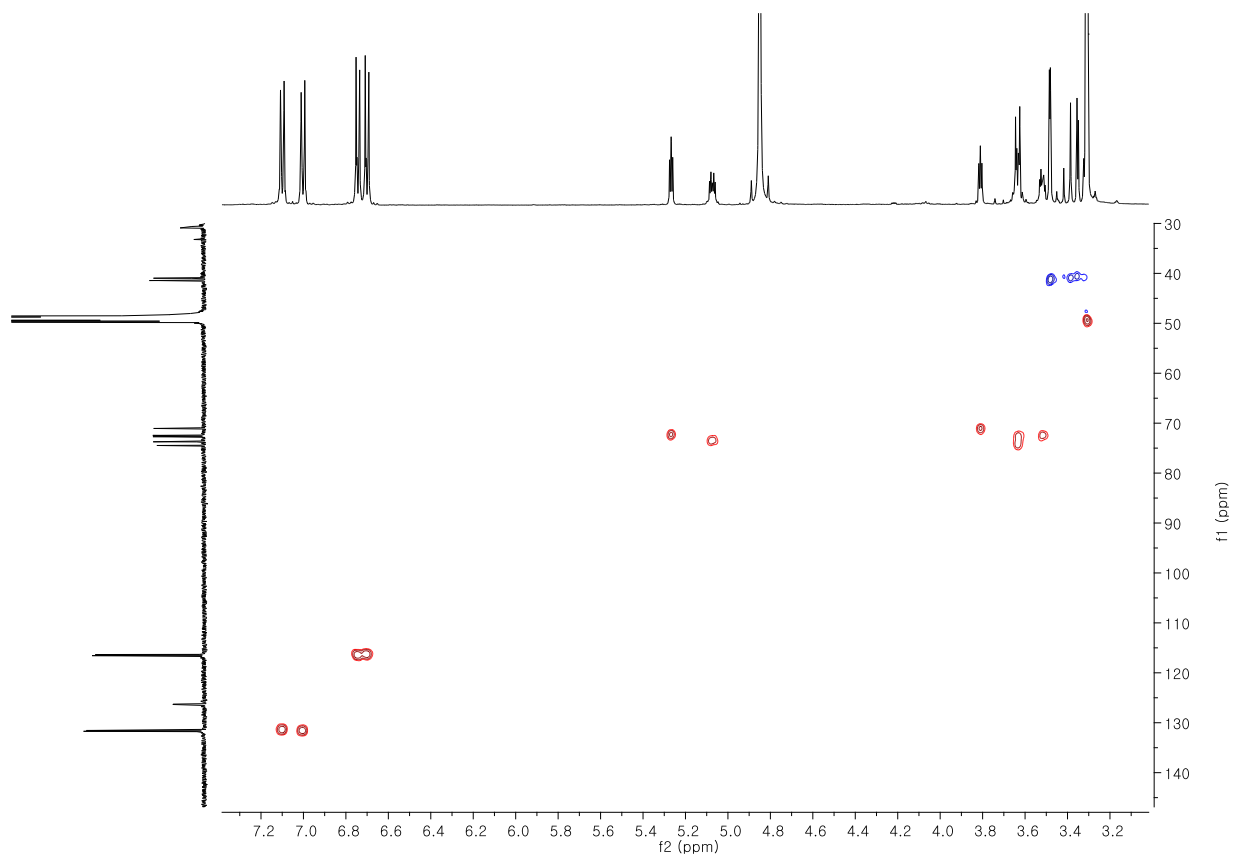


Fig. 37. HSQC spectrum of compound **7**

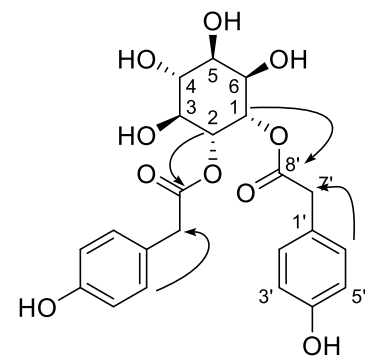
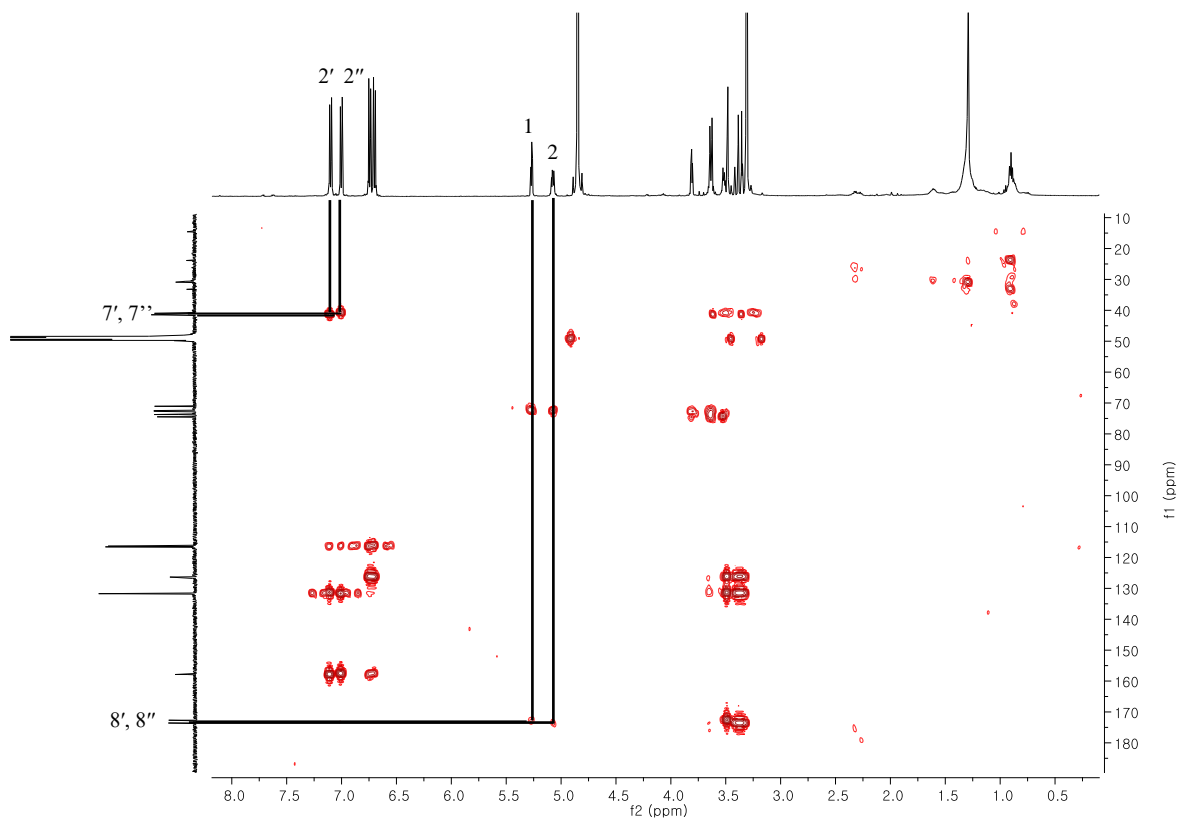


Fig. 38. HMBC spectrum of compound **7**

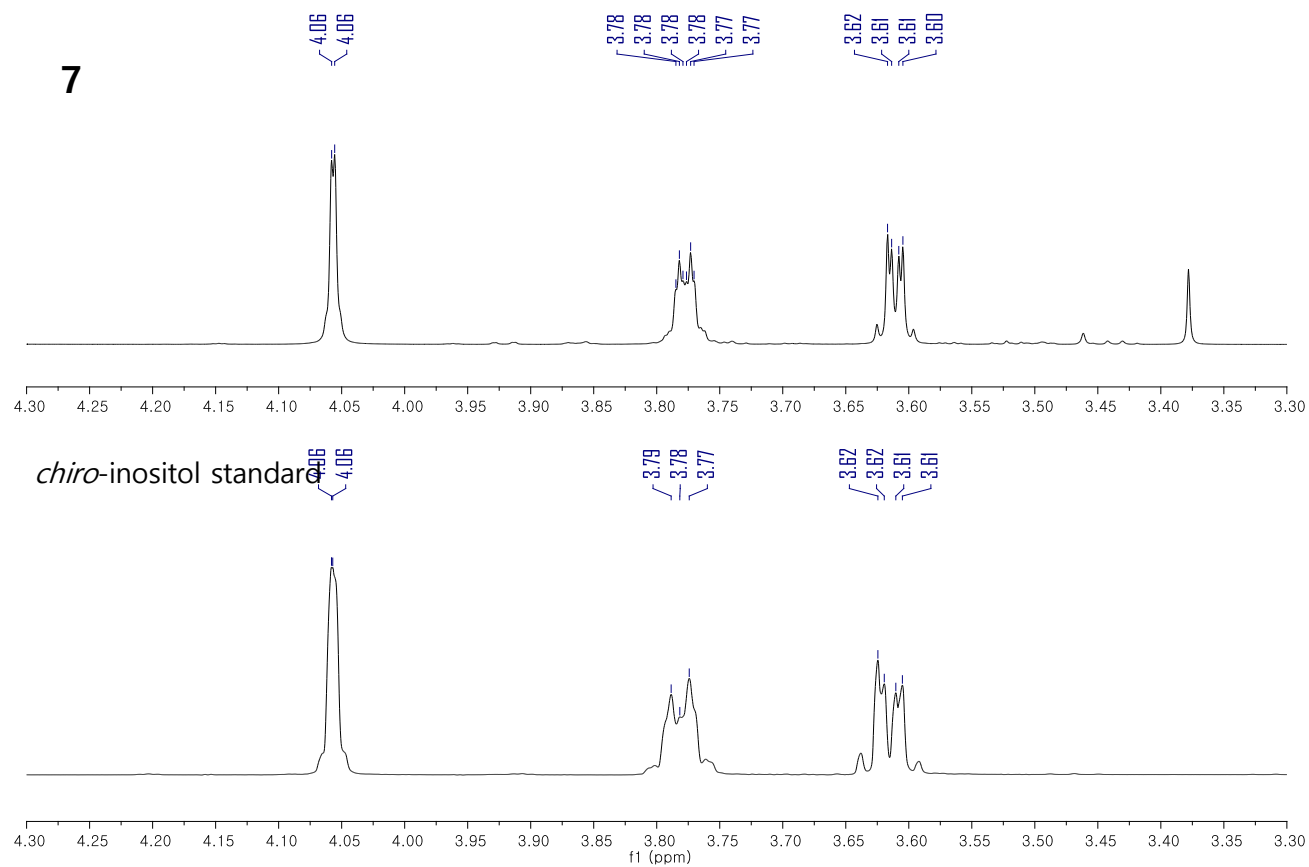


Fig. 39. ^1H -NMR spectra of inositol of **7** and *chiro*-inositol standard

1.8 화합물 8의 구조

무색 무정형 화합물 8은 분자식이 $C_{22}H_{24}O_{10}$ 이다 [m/z 471.1281 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{22}H_{24}O_{10}Na$, 471.1267)]. 1H , ^{13}C NMR spectra가 화합물 7과 거의 유사하며, functional group의 위치가 다르다. 1H NMR spectrum를 통해 두 개의 1,4-치환체 [δ_H 7.13 (2H, d, $J = 8.6$ Hz), 7.12 (2H, d, $J = 8.5$ Hz), 6.72 (2H, d, $J = 8.5$ Hz), 6.72 (2H, d, $J = 8.5$ Hz)], 두 개의 methylene기 [δ_H 3.64 (2H, d, $J = 2.3$ Hz), 3.63 (2H, d, $J = 1.8$ Hz)], 하나의 cyclohexane [δ_H 5.19 (1H, t, $J = 9.8$ Hz), 5.10 (1H, dd, $J = 10.2, 3.1$ Hz), 4.04 (1H, t, $J = 3.5$ Hz), 3.92 (1H, t, $J = 9.8$ Hz), 3.92 (1H, t, $J = 3.2$ Hz), 3.87 (1H, dd, $J = 9.9, 3.1$ Hz)]의 존재를 추정할 수 있다. ^{13}C NMR spectrum에서 두 개의 aromatic 링 (δ_C 157.6, 157.5, 131.7, 131.6, 126.7, 126.5, 116.3, 116.2), 두 개의 carbonyl기 (δ_C 174.2, 173.8), 여섯 개의 oxygenated carbon (δ_C 77.1, 75.8, 73.9, 71.0, 70.6, 70.5)과 두 개의 methylene 피크 (δ_C 41.2, 41.0)을 확인하였다. Down-field shift 된 1번, 3번 proton으로 두 개의 4-hydroxyphenylacetyl기가 1, 3번에 연결되어 있는 것을 추정할 수 있으며, HMBC를 통하여 이를 확인하였다. 입체구조는 coupling constant에 의거하여 H-1, H-2, H-3 그리고 H-6은 axial, 나머지 H-4, H-5는 equatorial 형태임을 확인하였다. 산 가수분해를 한 뒤, inositol의 NMR과 선광도 값 $[[\alpha]_D^{20} + 48.0$ (c 0.1, H_2O)]으로 D-chiro-inositol임을 확인하였고, 이것으로 화합물 8을 1D-1,3-di-O-4-hydroxyphenylacetyl-chiro-inositol로 동정하였다.

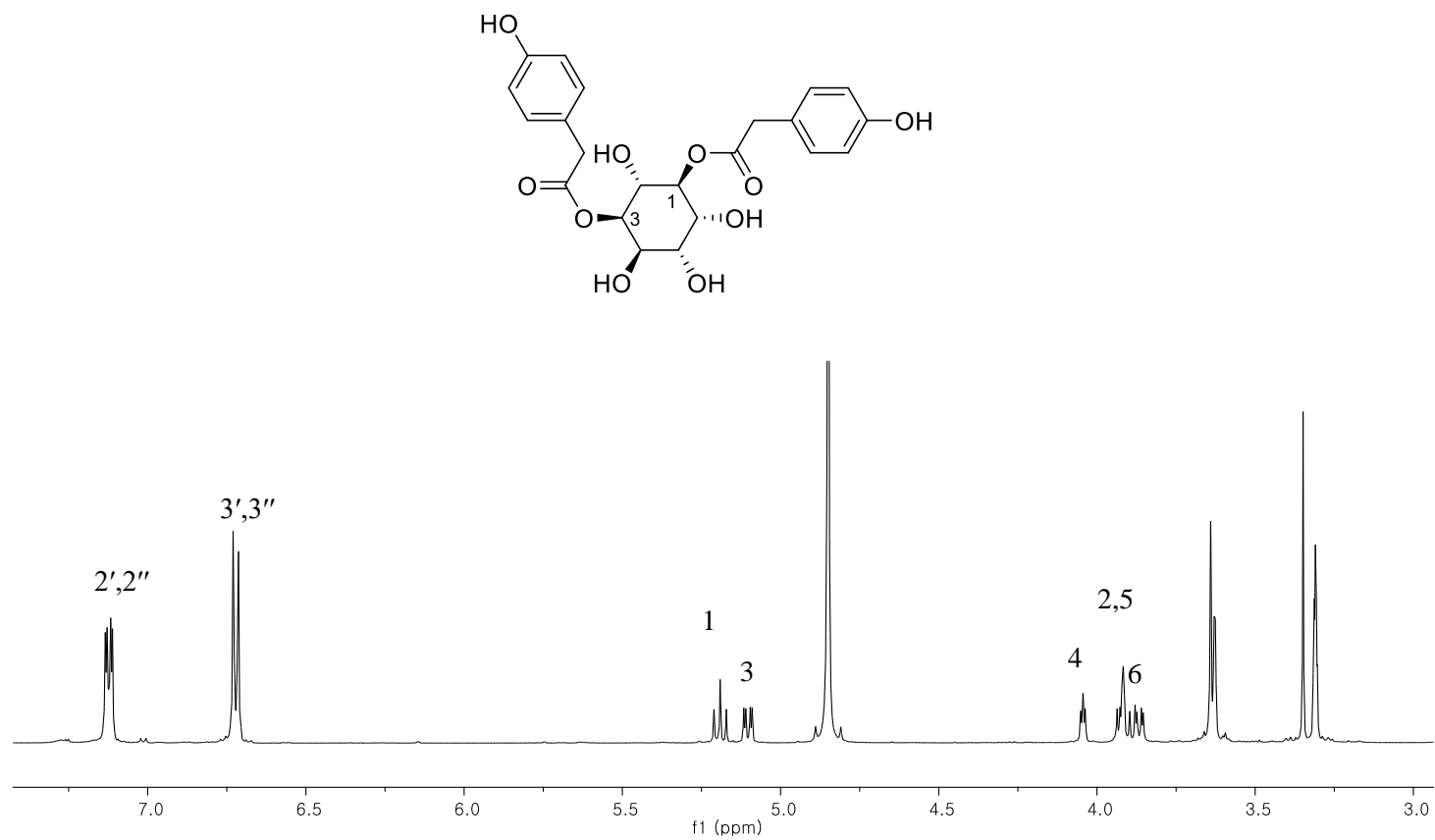


Fig. 40. ^1H -NMR spectrum of compound **8**

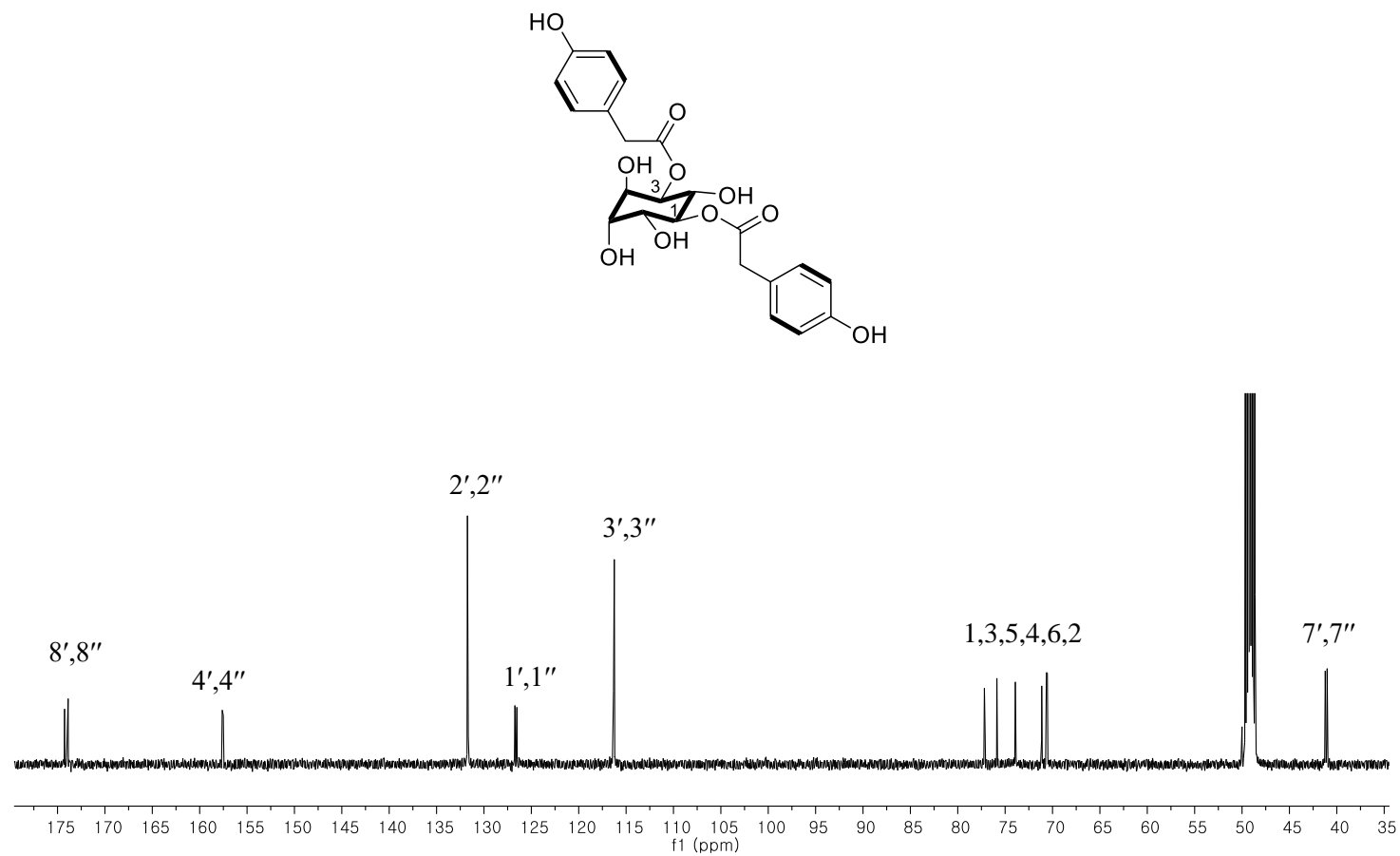


Fig. 41. ^{13}C -NMR spectrum of compound **8**

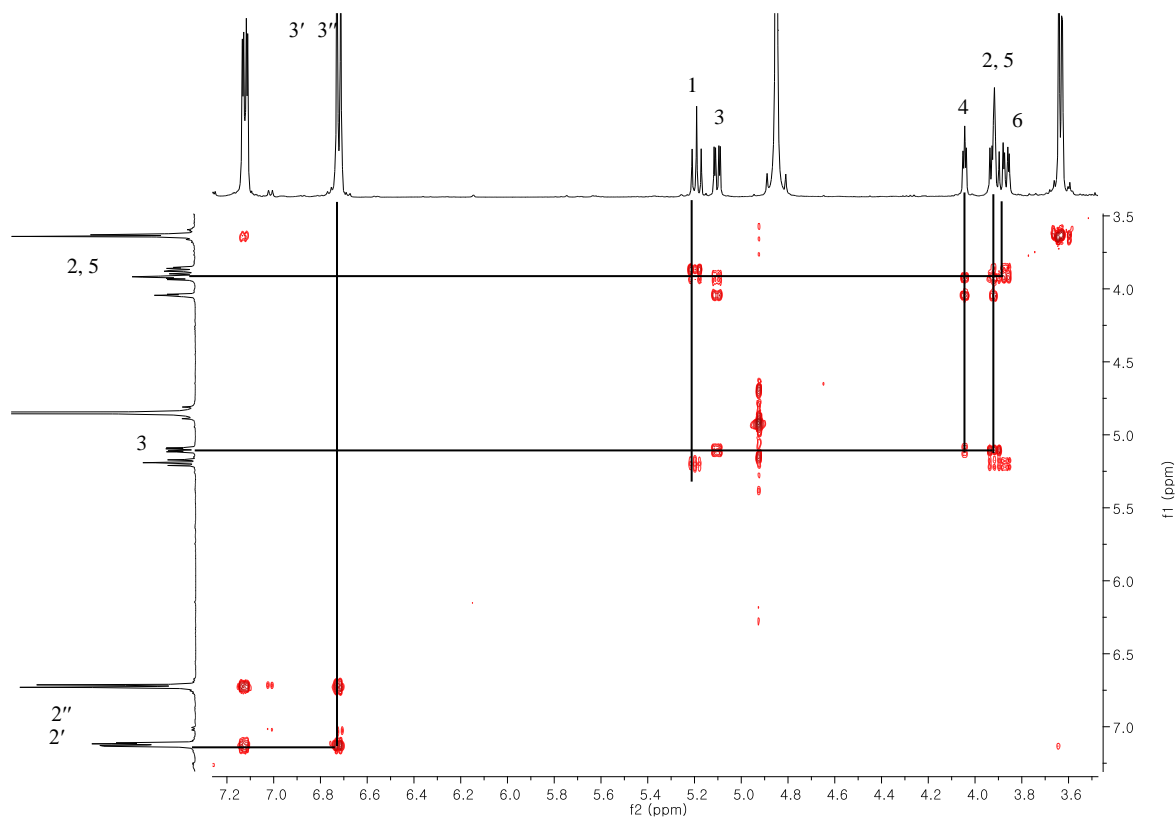


Fig. 42. ^1H - ^1H COSY spectrum of compound **8**

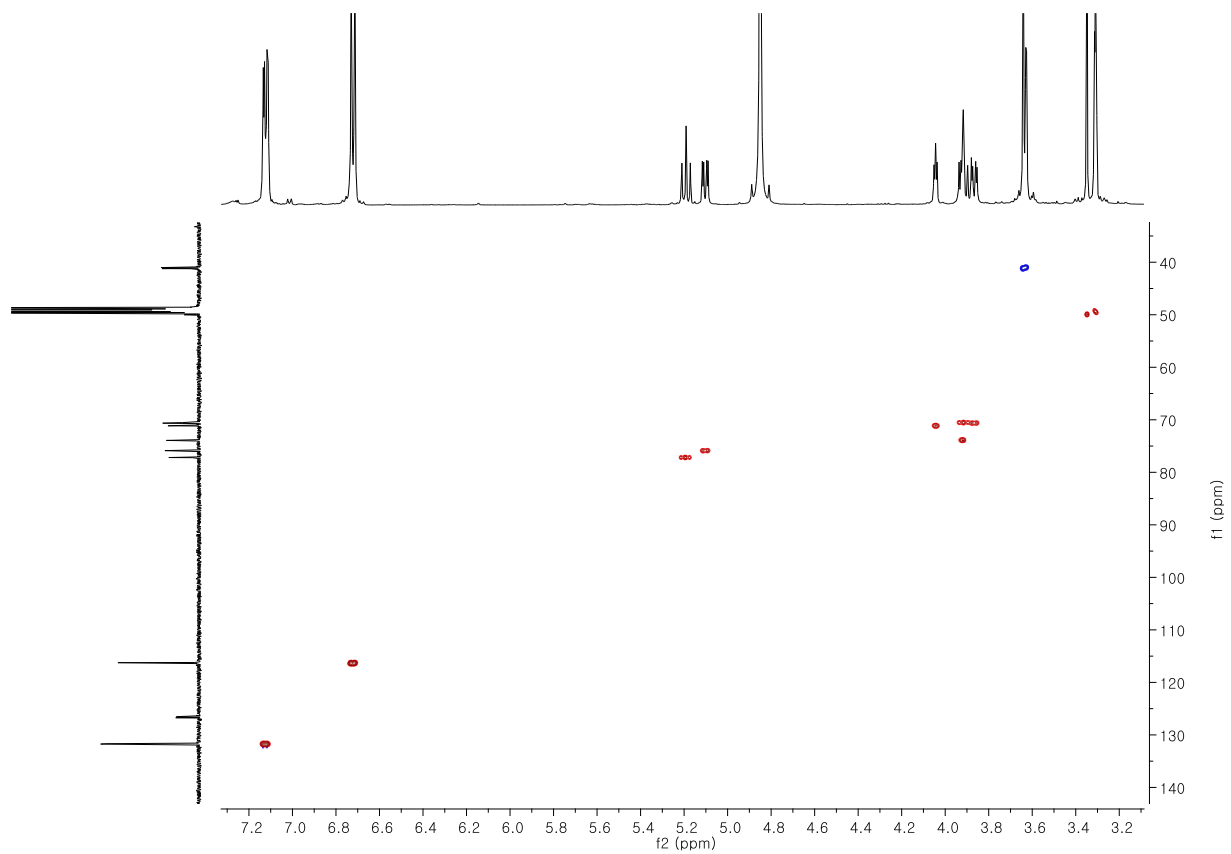


Fig. 43. HSQC spectrum of compound **8**

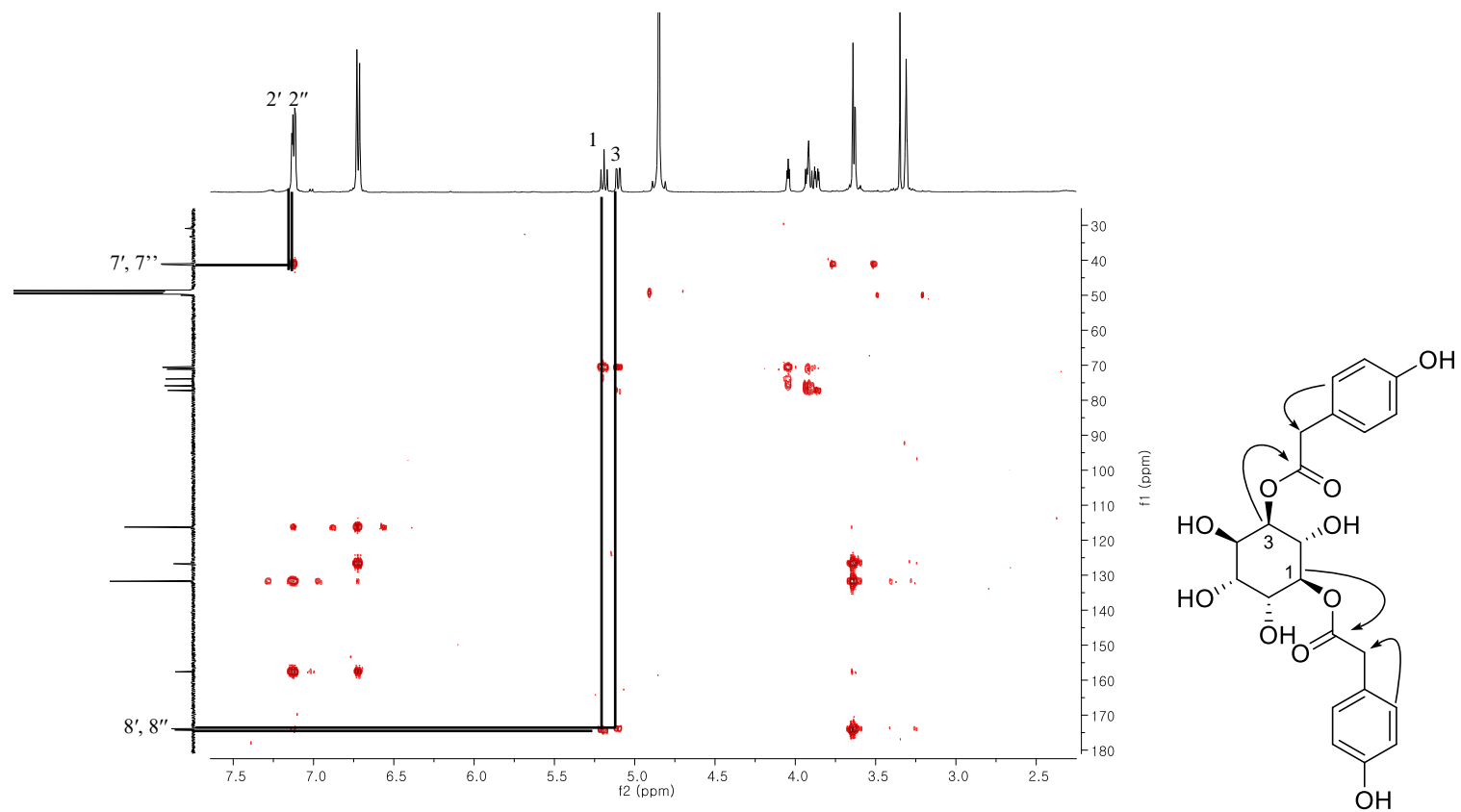


Fig. 44. HMBC spectrum of compound **8**

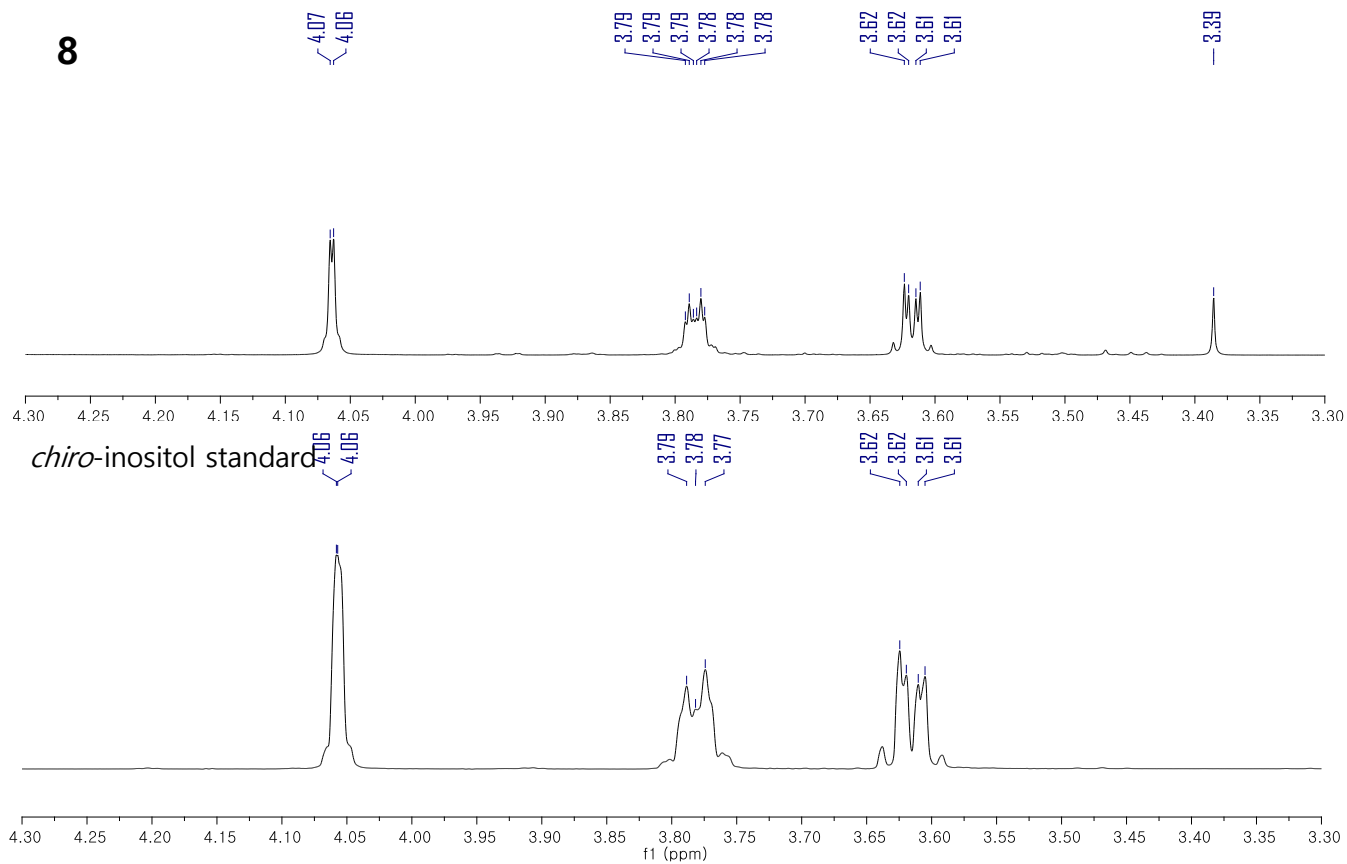


Fig. 45. ¹H-NMR spectra of inositol of **8** and *chiro*-inositol standard

1.9 화합물 9의 구조

화합물 9는 무색무정형 화합물이며 HRESIMS 데이터 [m/z 605.1664 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{30}H_{30}O_{12}Na$, 605.1635)]을 통하여 분자식 $C_{30}H_{30}O_{12}$ 을 구할 수 있다. 1H , ^{13}C NMR spectra를 통하여 화합물 9의 구조가 화합물 7과 매우 유사함을 알 수 있다. 다른 점은 하나의 4-hydroxyphenylacetyl기가 추가되었다는 점이다. 1H NMR spectrum에서 세 개의 1,4-치환체 [δ_H 7.10 (2H, d, $J = 8.5$ Hz), 7.10 (2H, d, $J = 8.5$ Hz), 7.10 (2H, d, $J = 8.5$ Hz), 6.74 (2H, d, $J = 8.5$ Hz), 6.71 (2H, d, $J = 8.5$ Hz), 6.71 (2H, d, $J = 8.5$ Hz)], 세 개의 methylene기 [δ_H 3.61 (2H, d, $J = 4.3$ Hz), 3.50 (2H, m), 3.50 (2H, m)], 하나의 cyclohexane [δ_H 5.25 (1H, t, $J = 3.6$ Hz), 5.08 (1H, t, $J = 3.7$ Hz), 4.83 (1H, dd, $J = 10.0, 3.3$ Hz), 3.71 (1H, dd, $J = 9.7, 3.3$ Hz), 3.64 (1H, overlap), 3.54 (1H, overlap)]의 존재를 추정할 수 있다. ^{13}C NMR spectrum에서 세 개의 aromatic 링 (δ_C 157.9, 157.6, 157.6, 131.7, 131.6, 131.5, 126.1, 126.1, 126.0, 116.5, 116.5, 116.3), 세 개의 carbonyl기 (δ_C 173.4, 172.8, 172.2), 여섯 개의 oxygenated carbon (δ_C 74.6, 73.6, 72.4, 72.3, 70.7, 69.0)과 세 개의 methylene 피크 (δ_C 41.2, 40.9, 40.8)를 확인하였다. Chemical shift와 HMBC를 통해 inositol 3번위치에 functional group이 연결되어있다는 것을 추정할 수 있다. 입체구조는 coupling constant를 통해 H-3, H-4, H-5, H-6가 axial, H-1, H-2는 equatorial 형태임을 동정하였다. 산 가수분해 후 1H NMR spectrum과 선광도 값 [$[\alpha]_D^{20} +55.7$ (c 0.1, H_2O)]을 통하여 D-chiro-inositol을 동정하였고,

위와 같은 결과로 화합물 **9**를 1D-1,2,3-tri-*O*-4-hydroxyphenylacetyl-*chiro*-inositol로 동정하였다.

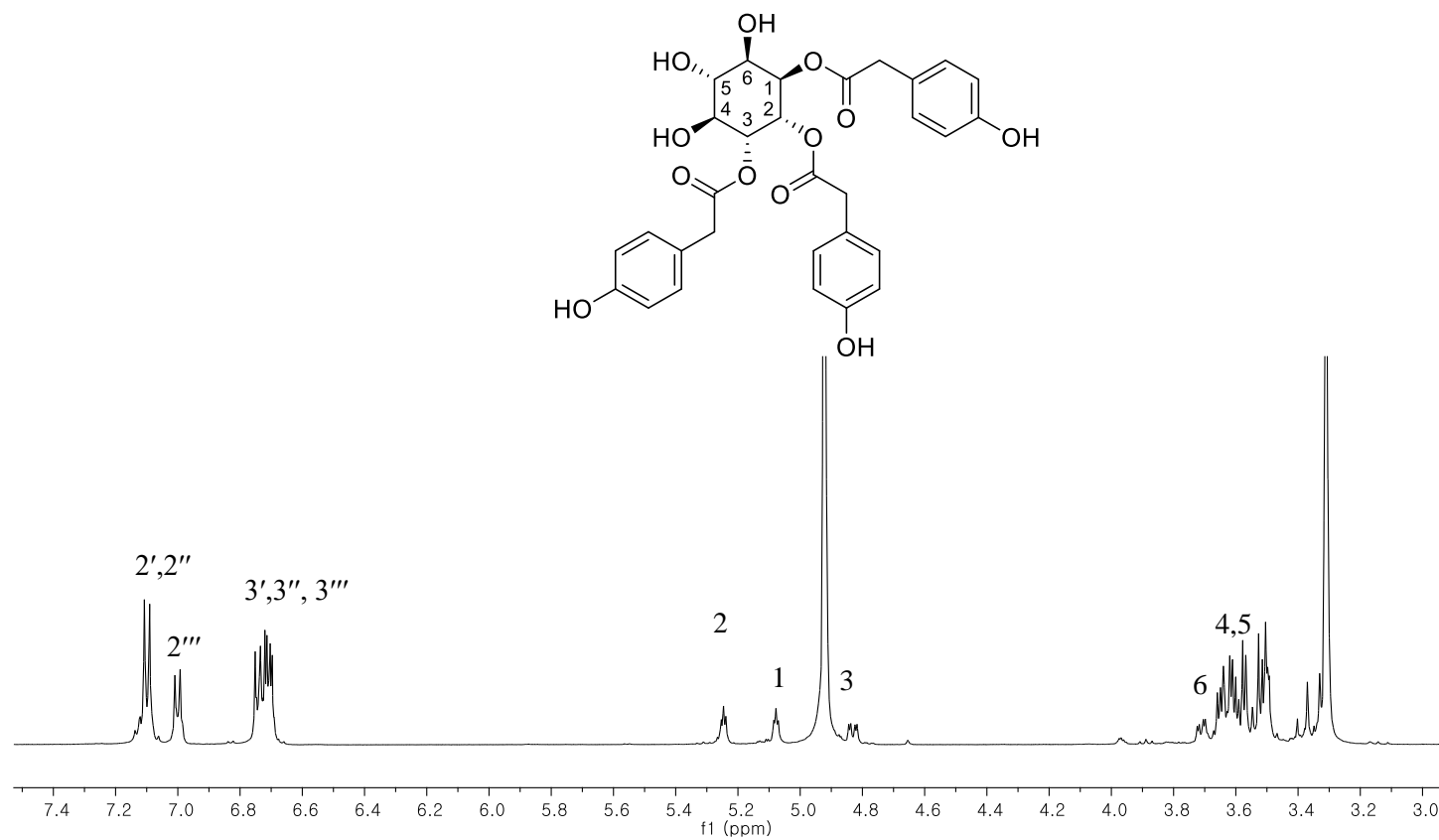


Fig. 46. ^1H -NMR spectrum of compound **9**

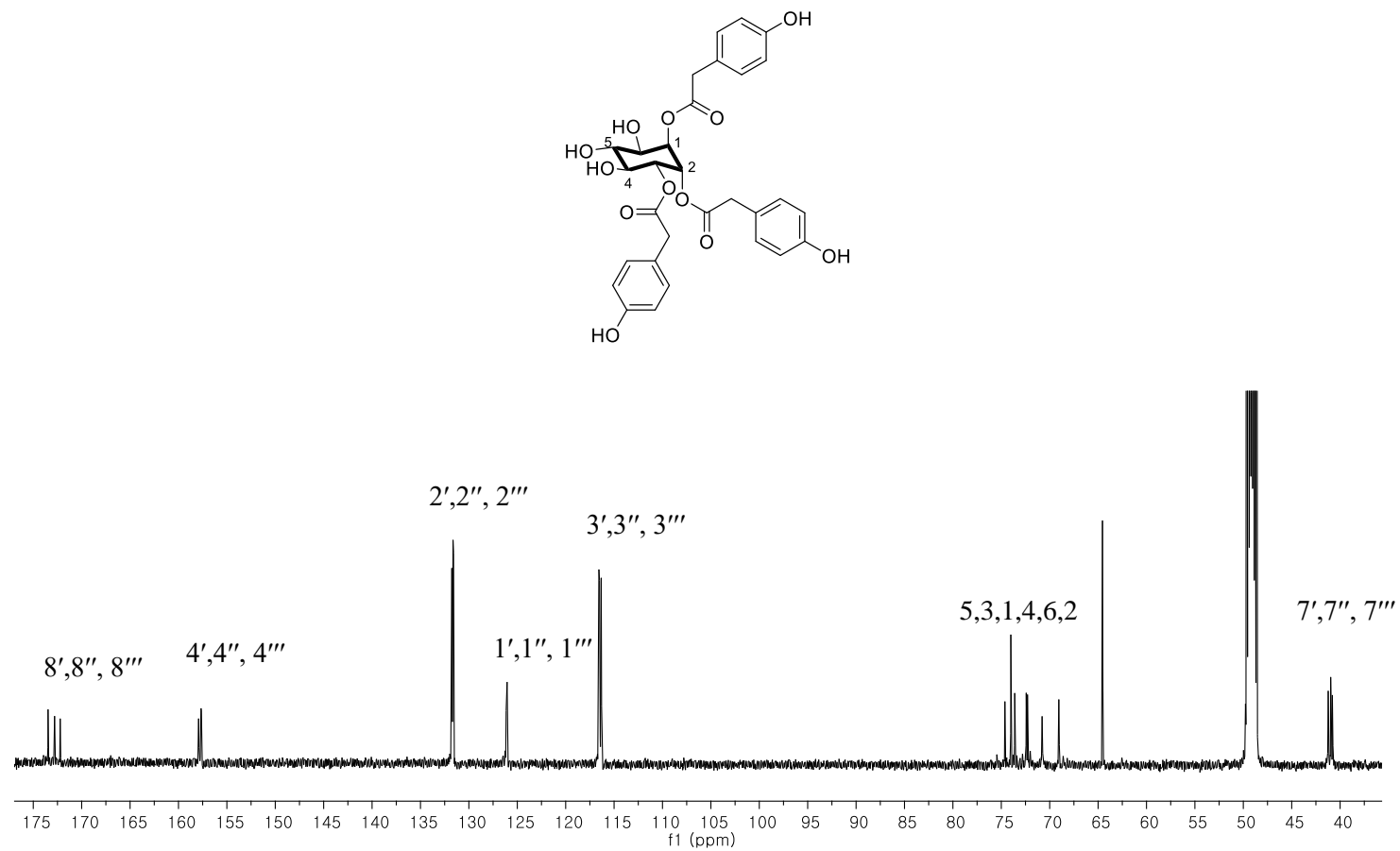


Fig. 47. ^{13}C -NMR spectrum of compound **9**

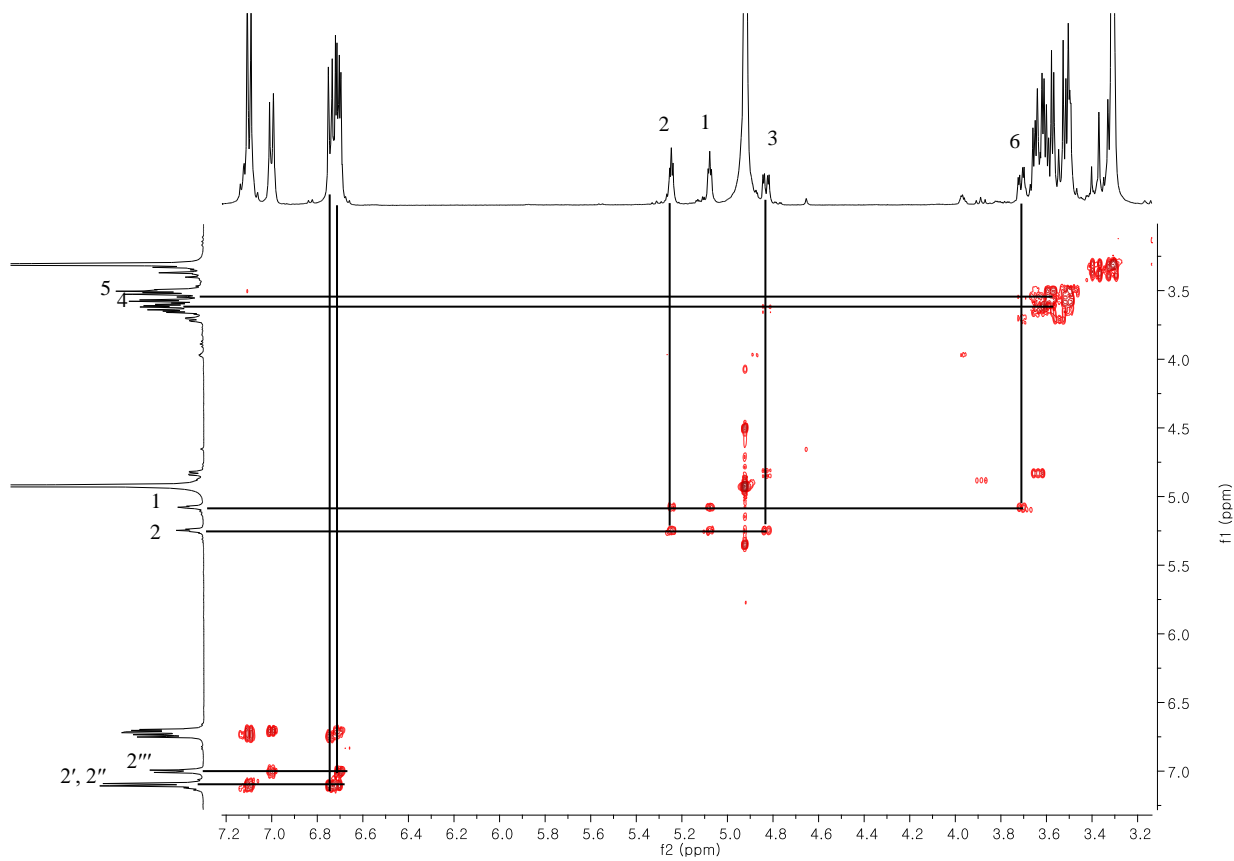


Fig. 48. ^1H - ^1H COSY spectrum of compound **9**

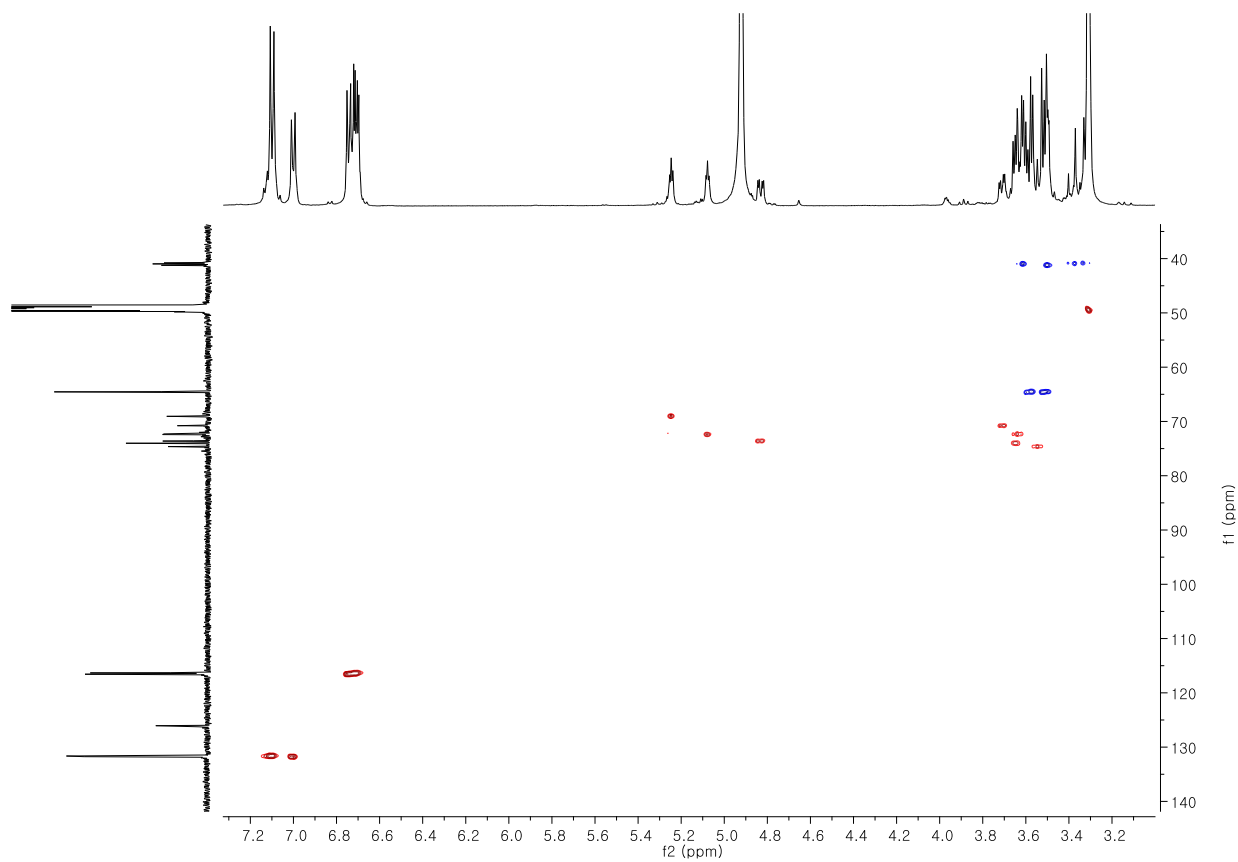


Fig. 49. HSQC spectrum of compound **9**

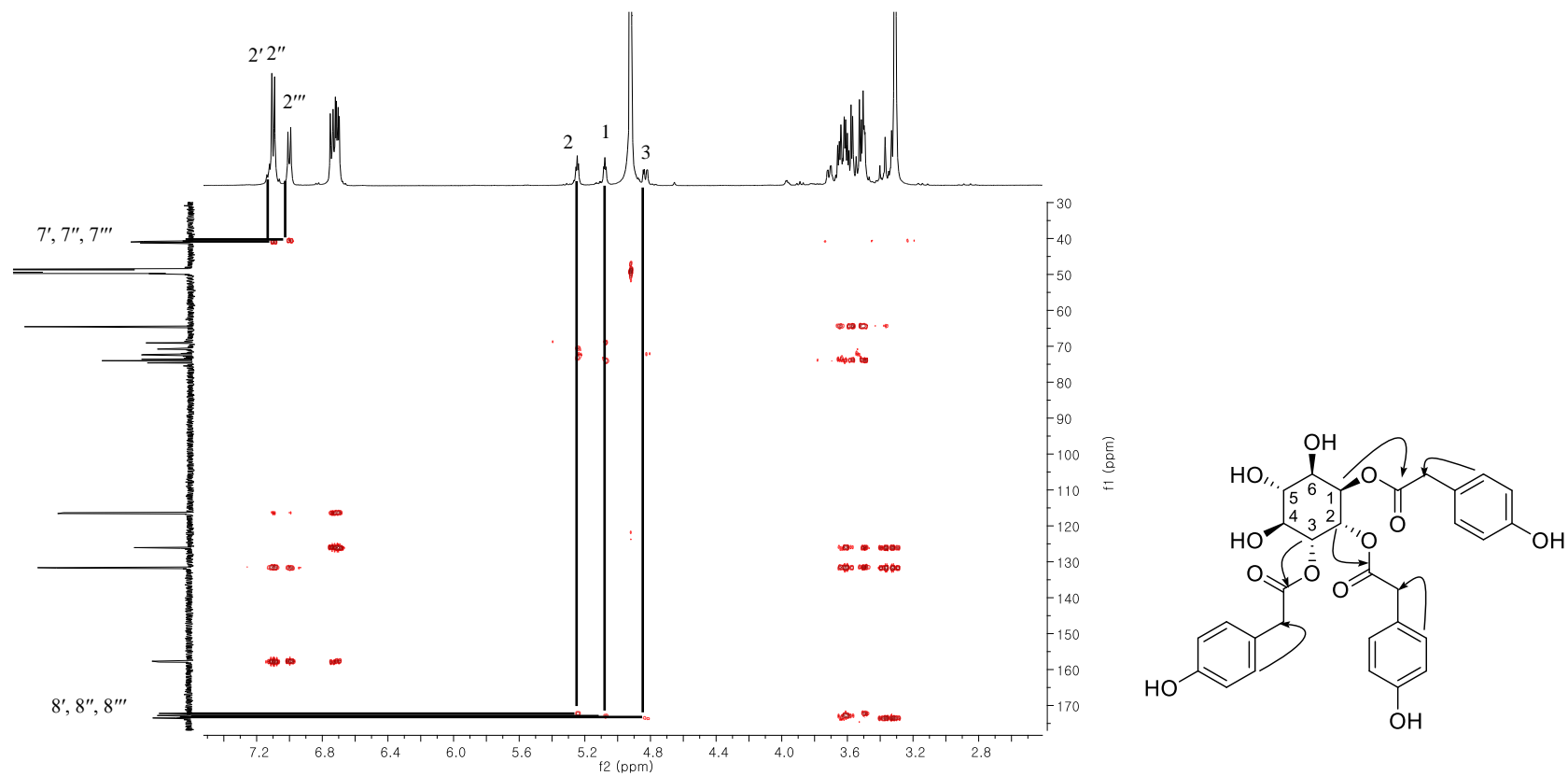


Fig. 50. HMBC spectrum of compound **9**

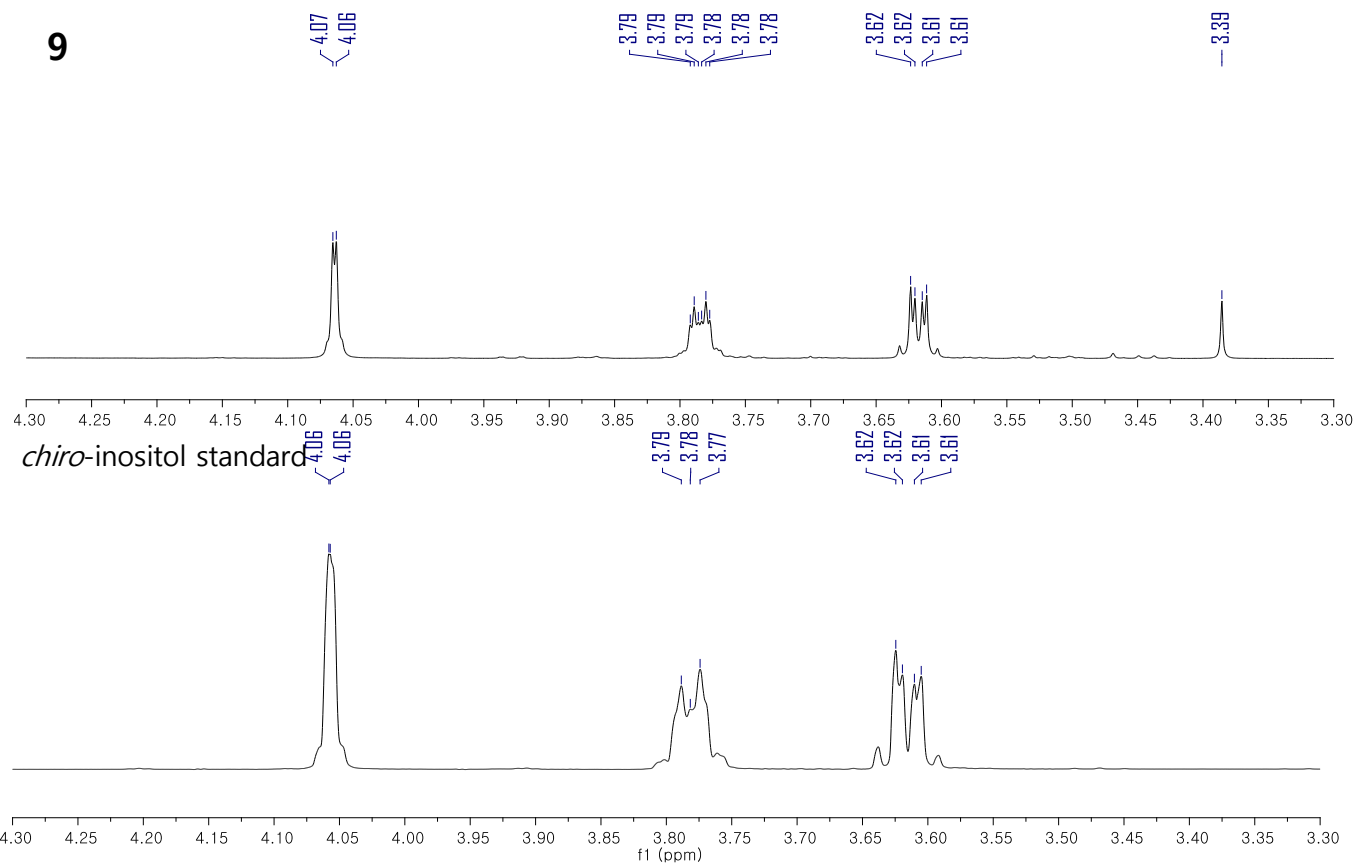


Fig. 51. ¹H-NMR spectra of inositol of **9** and *chiro*-inositol standard

1.10 화합물 **10**의 구조

화합물 **10**은 무색무정형 화합물로 HRESIMS [m/z 581.1672 [M-H]⁻, (calcd. for C₃₀H₂₉O₁₂, 581.1659)]를 통하여 분자식 C₃₀H₃₀O₁₂을 구하였다. 1D NMR spectra가 화합물 **9**와 functional group의 연결부위를 제외하면 거의 유사하다. ¹H NMR spectrum에서 세 개의 1,4-치환체 [δ_H 7.13 (2H, d, J = 8.6 Hz), 7.11 (2H, d, J = 8.6 Hz), 6.99 (2H, d, J = 8.6 Hz), 6.74 (2H, d, J = 8.6 Hz), 6.73 (2H, d, J = 8.6 Hz), 6.70 (2H, d, J = 8.6 Hz)], 세 개의 methylene기 [δ_H 3.64 (2H, d, J = 2.4 Hz), 3.51 (2H, d, J = 1.6 Hz), 3.35 (2H, s)], 하나의 cyclohexane [δ_H 5.26 (1H, t, J = 3.8 Hz), 5.10 (1H, dd, J = 10.1, 3.4 Hz), 4.87 (1H, dd, J = 9.4, 3.8 Hz), 3.97 (1H, t, J = 3.8 Hz), 3.89 (1H, dd, J = 10.0, 9.4 Hz), 3.69 (1H, dd, J = 10.0, 9.5 Hz)]을, ¹³C NMR spectrum에서 세 개의 aromatic 링 (δ_C 157.8, 157.6, 157.6, 131.7, 131.6, 131.6, 126.4, 126.2, 126.1, 116.5, 116.3, 116.3), 세 개의 carbonyl기 (δ_C 173.9, 173.5, 172.6), 여섯 개의 oxygenated carbon (δ_C 75.4, 73.4, 72.8, 72.2, 72.0, 68.6)과 세 개의 methylene 피크 (δ_C 41.3, 40.9, 40.9)를 확인하였다. Down-field shift된 H-1, H-2, H-5의 chemical shift를 통하여 연결을 추정할 수 있었으며, 문헌과의 비교를 통하여 화합물 **10**을 1D-1,2,5-tri-*O*-4-hydroxyphenylacetyl-*chiro*-inositol로 동정하였다 (Kenny et al., 2014).

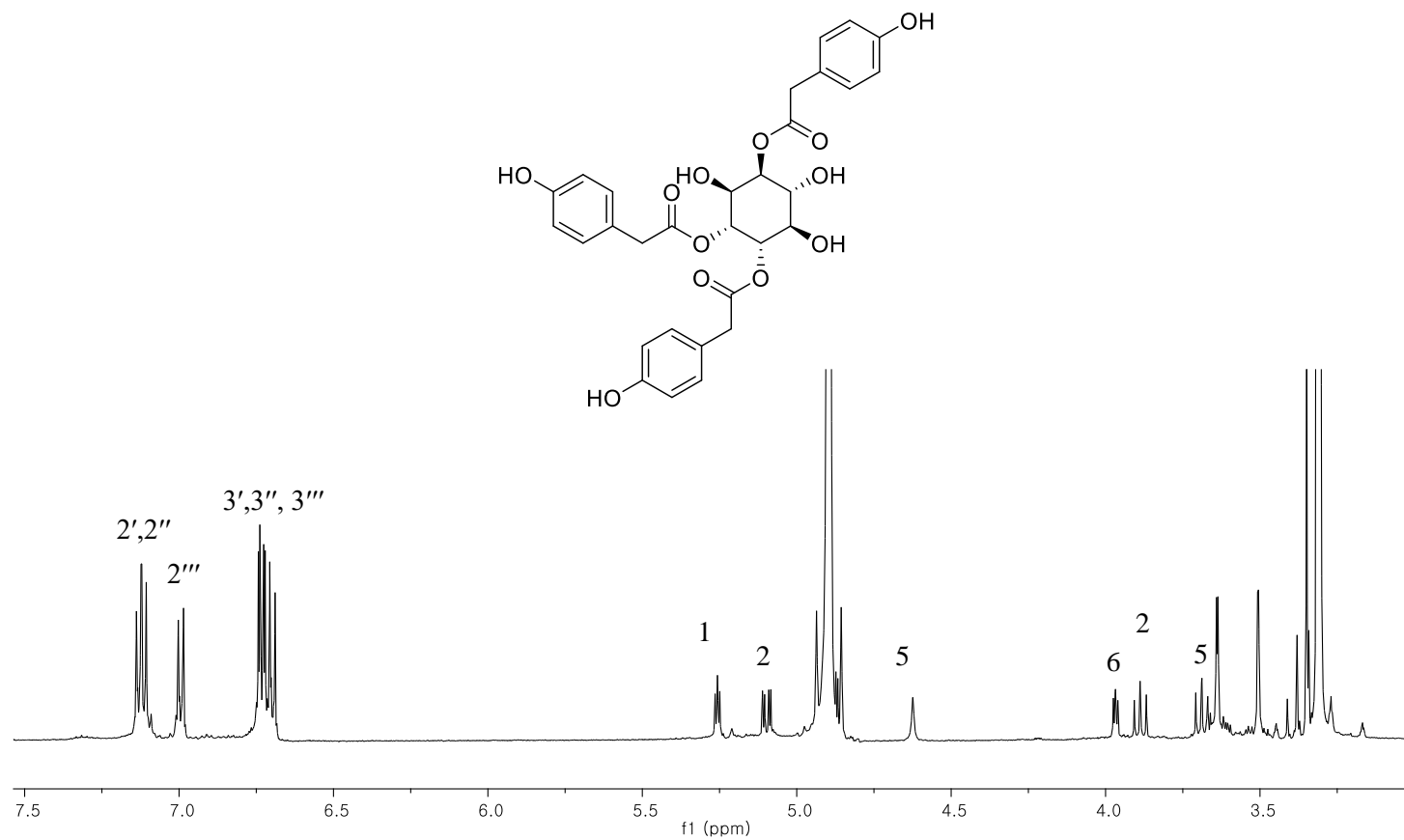


Fig. 52. ^1H -NMR spectrum of compound **10**

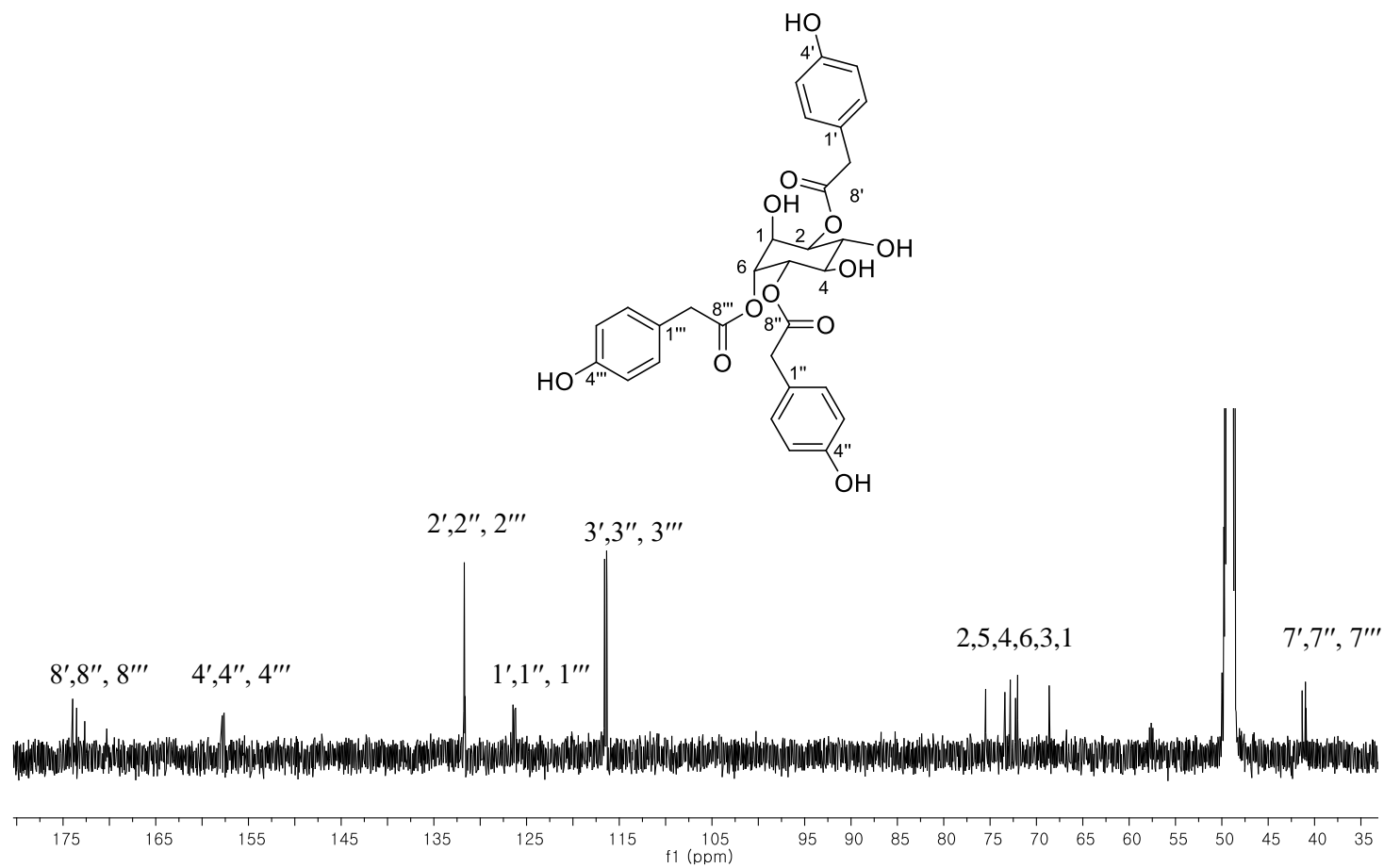


Fig. 53. ^{13}C -NMR spectrum of compound **10**

1.11 화합물 **11**의 구조

무색무정형 화합물 **11**은 분자식이 $C_{21}H_{28}O_9$ 이며 $[m/z\ 605.1658\ [M+Na]^+$ (calcd. for $C_{30}H_{30}O_{12}Na$, 605.1635)], 1D NMR spectra가 화합물 **9**와 거의 유사하다. 1H NMR spectrum에서 세 개의 1,4-치환체 [δ_H 7.13 (2H, d, $J = 8.5$ Hz), 7.11 (2H, d, $J = 8.5$ Hz), 7.11 (2H, d, $J = 8.5$ Hz), 6.74 (2H, d, $J = 8.5$ Hz), 6.73 (2H, d, $J = 8.5$ Hz), 6.67 (2H, d, $J = 8.5$ Hz)], 세 개의 methylene기 [δ_H 3.64 (2H, d, $J = 2.4$ Hz), 3.64 (2H, d, $J = 2.4$ Hz), 3.64 (2H, d, $J = 2.4$ Hz)], 하나의 cyclohexane [δ_H 5.27 (1H, t, $J = 3.7$ Hz), 5.23 (1H, t, $J = 10.4$ Hz), 5.13 (1H, dd, $J = 10.5, 3.3$ Hz), 3.82 (1H, t, $J = 3.7$ Hz), 3.78 (1H, t, $J = 9.6$ Hz), 3.60 (1H, dd, $J = 9.7, 3.1$)]을 동정하였고, ^{13}C NMR spectrum에서 세 개의 aromatic 링 (δ_C 157.8, 157.7, 157.6, 131.7, 131.6, 131.6, 126.9, 126.5, 126.1, 116.6, 116.5, 116.3), 세 개의 carbonyl기 (δ_C 173.2, 172.8, 172.6), 여섯 개의 oxygenated carbon (δ_C 73.9, 72.5, 72.3, 72.0, 71.5, 70.8)과 세 개의 methylene 피크 (δ_C 41.4, 41.3, 40.6)를 확인하였다. Down-field shift된 H-4, H-5, H-6을 통하여 세 개의 4-hydroxyphenylacetyl기가 4, 5, 6번에 연결되어 있는 것을 추정할 수 있고, 문헌과의 비교를 통하여 화합물 **11**을 1D-4,5,6-tri-*O*-4-hydroxyphenylacetyl-*chiro*-inositol로 동정하였다 (Liu et al., 2014).

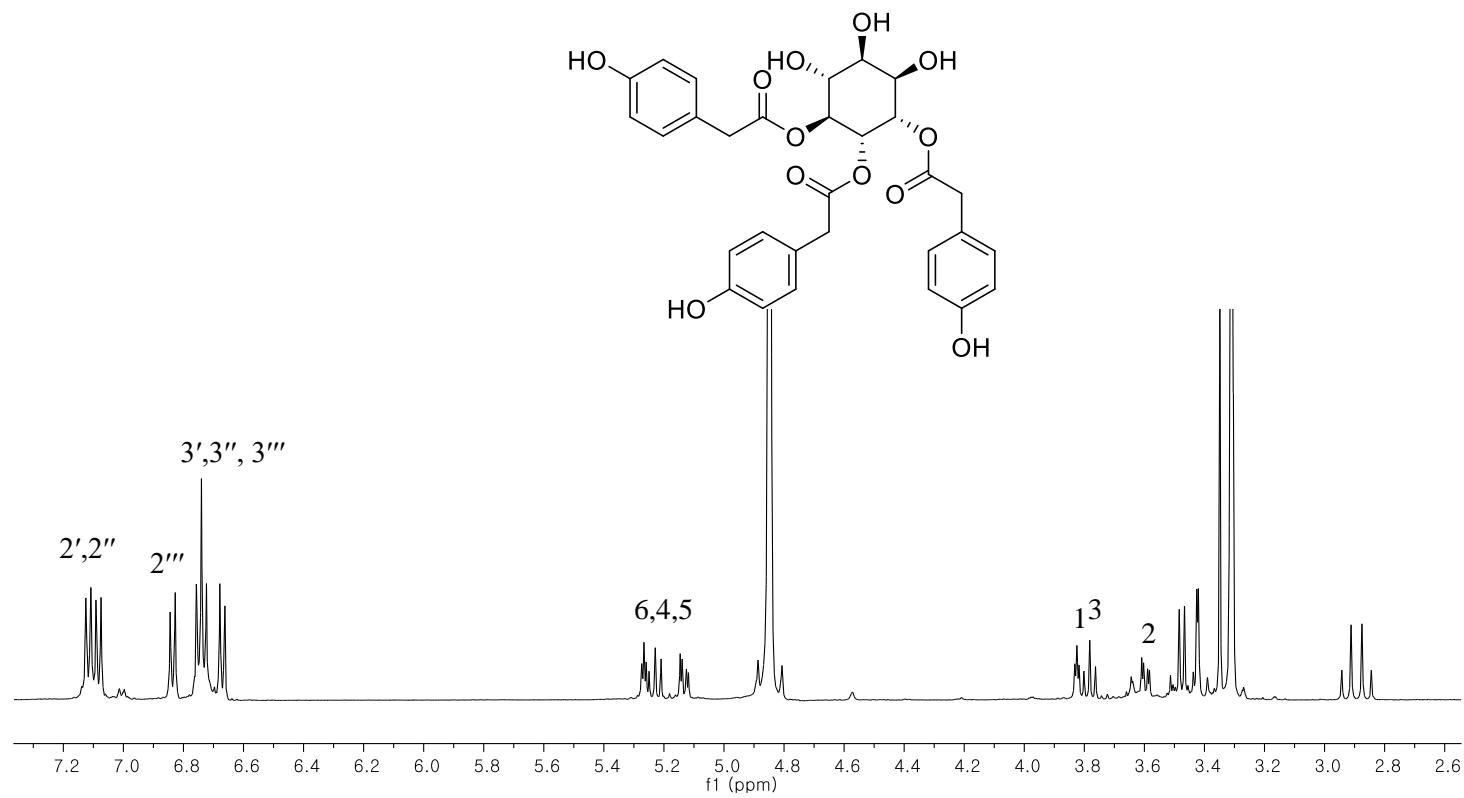


Fig. 54. ^1H -NMR spectrum of compound **11**

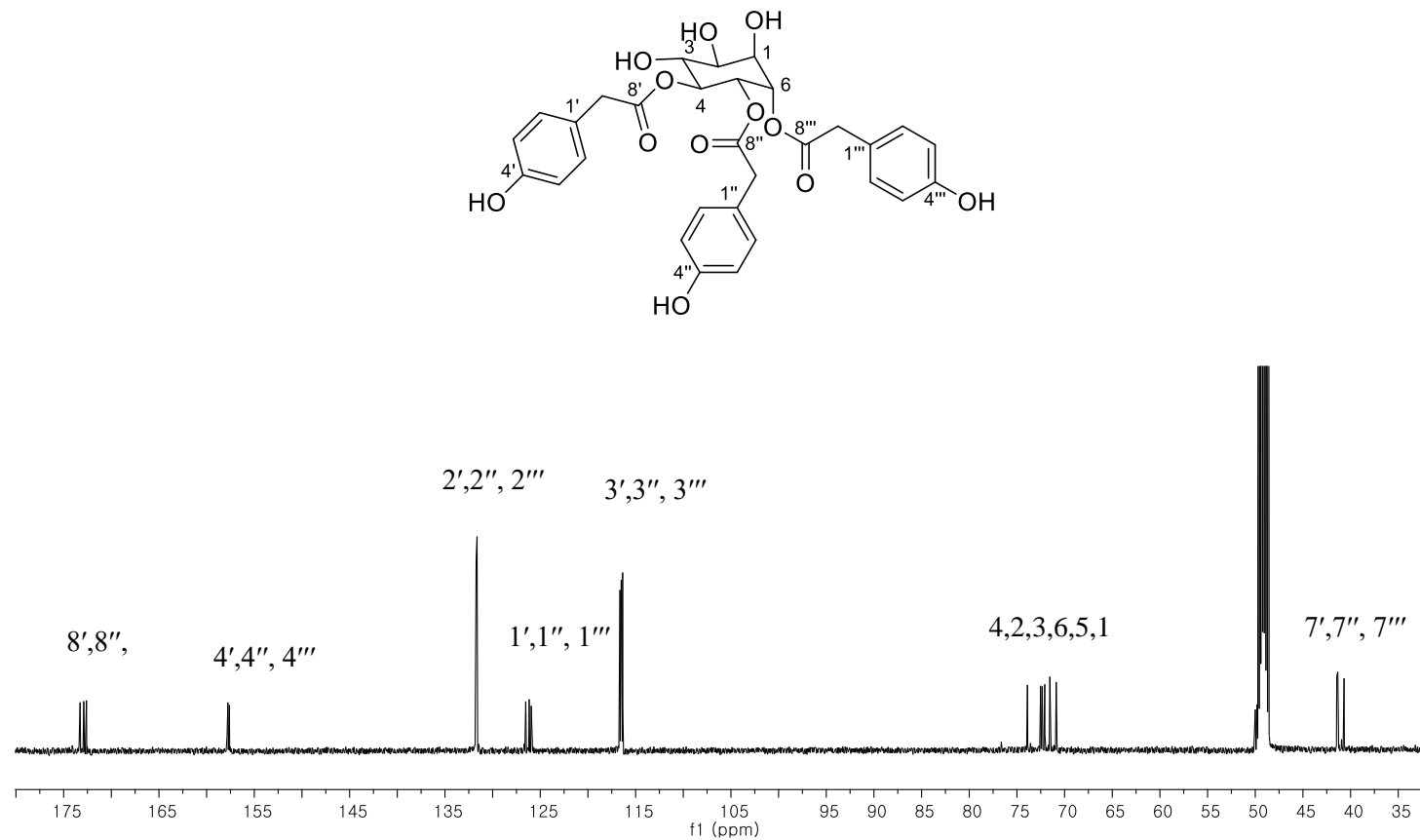


Fig. 55. ^{13}C -NMR spectrum of compound **11**

1.12 화합물 12의 구조

화합물 12는 무색무정형이며 HRESIMS [m/z 471.1285 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{22}H_{24}O_{10}Na$, 471.1267)]에 의해 분자식이 $C_{22}H_{24}O_{10}$ 인 화합물이다. 1H , ^{13}C NMR spectra를 통하여 화합물7과 같이 두 개의 functional group을 갖는 inositol 화합물 구조임을 추정할 수 있다. 1H NMR spectrum를 통해 두 개의 1,4-치환체 [δ_H 7.12 (2H, d, $J = 8.6$ Hz), 7.10 (2H, d, $J = 8.5$ Hz), 6.73 (2H, d, $J = 8.5$ Hz), 6.71 (2H, d, $J = 8.5$ Hz)], 두 개의 methylene기 [δ_H 3.63 (2H, d, $J = 3.6$ Hz), 3.60 (2H, d, $J = 3.2$ Hz)], 하나의 cyclohexane [δ_H 5.14 (1H, t, $J = 3.7$ Hz), 3.91 (1H, dd, $J = 9.8, 3.4$ Hz), 3.56 (1H, t, $J = 9.5$ Hz), 3.82 (1H, t, $J = 9.5$ Hz), 4.81 (1H, dd, $J = 10.2, 3.1$ Hz), 3.98 (1H, t, $J = 3.1$ Hz)]의 존재를 알 수 있으며, ^{13}C NMR spectrum에서 두 개의 aromatic 링 (δ_C 157.6, 157.6, 131.6, 131.6, 126.4, 126.2, 116.4, 116.3), 두 개의 carbonyl기 (δ_C 173.9, 173.3), 여섯 개의 oxygenated carbon (δ_C 75.8, 75.5, 75.1, 72.1, 70.3, 68.3)과 두 개의 methylene 피크(δ_C 41.1, 40.9)을 확인하였다. Down-field shift 된 H-1, H-5를 통하여 연결부위를 추측할 수 있고, 문헌과의 비교를 통하여 화합물 12를 1D-1,5-di-*O*-4-hydroxyphenylacetyl-*chiro*-inositol로 동정하였다 (Liu et al., 2014).

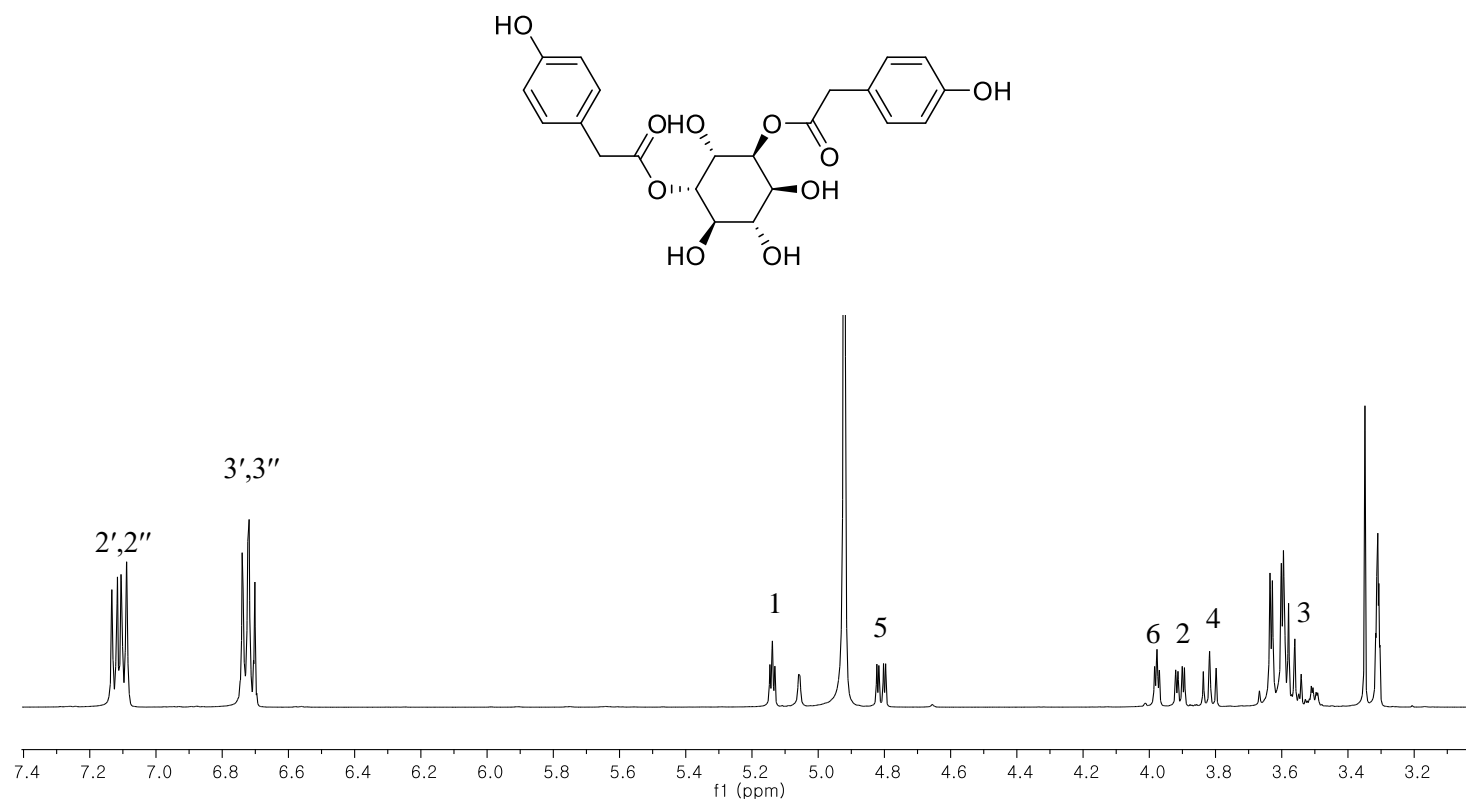


Fig. 56. ^1H -NMR spectrum of compound **12**

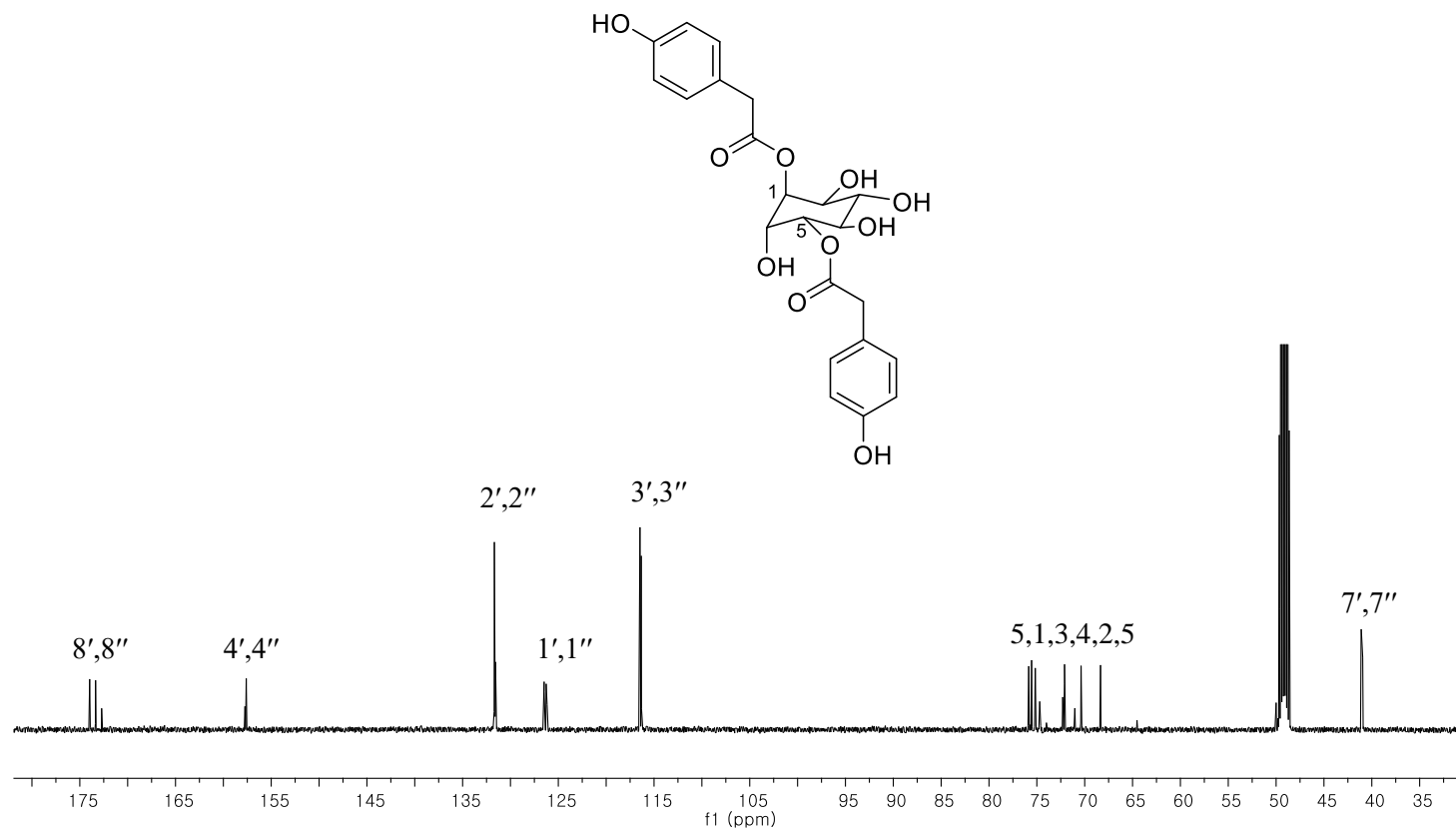


Fig. 57. ^{13}C -NMR spectrum of compound **12**

1.13 화합물 13의 구조

화합물 13은 무색무정형 화합물로서 분자식이 $C_{22}H_{24}O_{10}$ 이다 [m/z 471.1288 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{22}H_{24}O_{10}Na$, 471.1267)]. 1D NMR spectra를 통해 화합물 12와 같이 두 개의 functional group을 갖는 inositol 구조임을 알 수 있으나, 대칭형태를 띄는 것을 추정할 수 있다. 이는 전형적인 *neo*-inositol의 구조이며, 1H NMR spectrum를 통해 두 개의 1,4-치환체 [δ_H 7.12 (2H, d, $J = 8.6$ Hz) $\times 2$, 6.73 (2H, d, $J = 8.5$ Hz) $\times 2$], 두 개의 methylene기 [δ_H 3.63 (2H, d, $J = 3.6$ Hz) $\times 2$], 하나의 cyclohexane [δ_H 5.07 (1H, dd, $J = 9.6$, 2.1 Hz) $\times 2$, 4.01 (1H, d, $J = 1.8$ Hz) $\times 2$, 3.56 (1H, dd, $J = 9.5$, 2.6 Hz) $\times 2$]을 확인할 수 있으며, ^{13}C NMR spectrum에서 두 개의 aromatic 링 (δ_C 157.5 $\times 2$, 131.6 $\times 2$, 126.5 $\times 2$, 116.3 $\times 2$), 두 개의 carbonyl기 (δ_C 174.0 $\times 2$), 여섯 개의 oxygenated carbon (δ_C 75.6 $\times 2$, 72.5 $\times 2$, 71.4 $\times 2$)과 두 개의 methylene 피크 (δ_C 40.9 $\times 2$)을 확인하였다. 이상의 데이터와 문헌치의 비교를 통해 화합물 13을 1,4-di-*O*-4-hydroxyphenylacetyl-*neo*-inositol로 동정하였다 (Kenny et al., 2014).

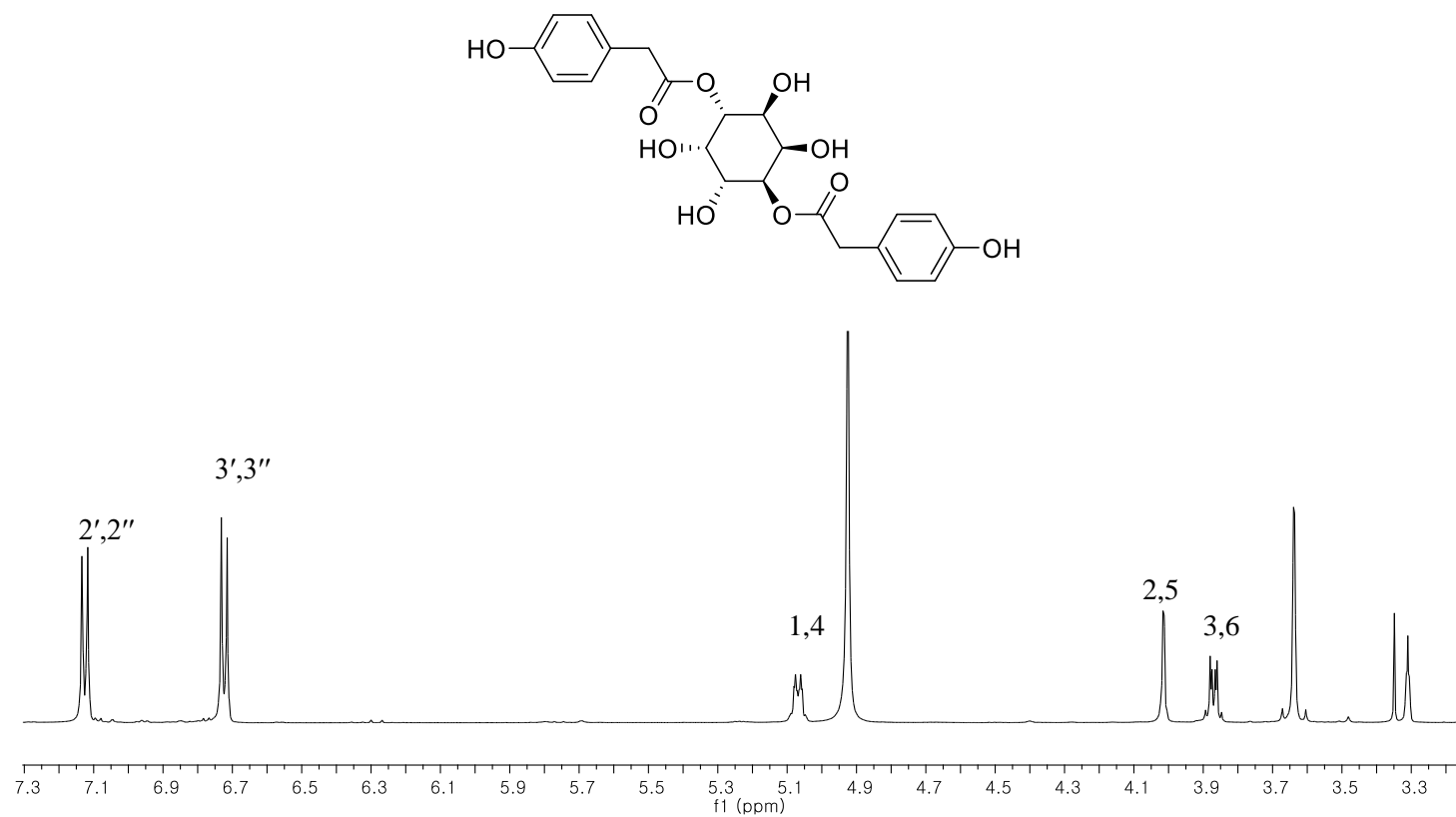


Fig. 58. ^1H -NMR spectrum of compound **13**

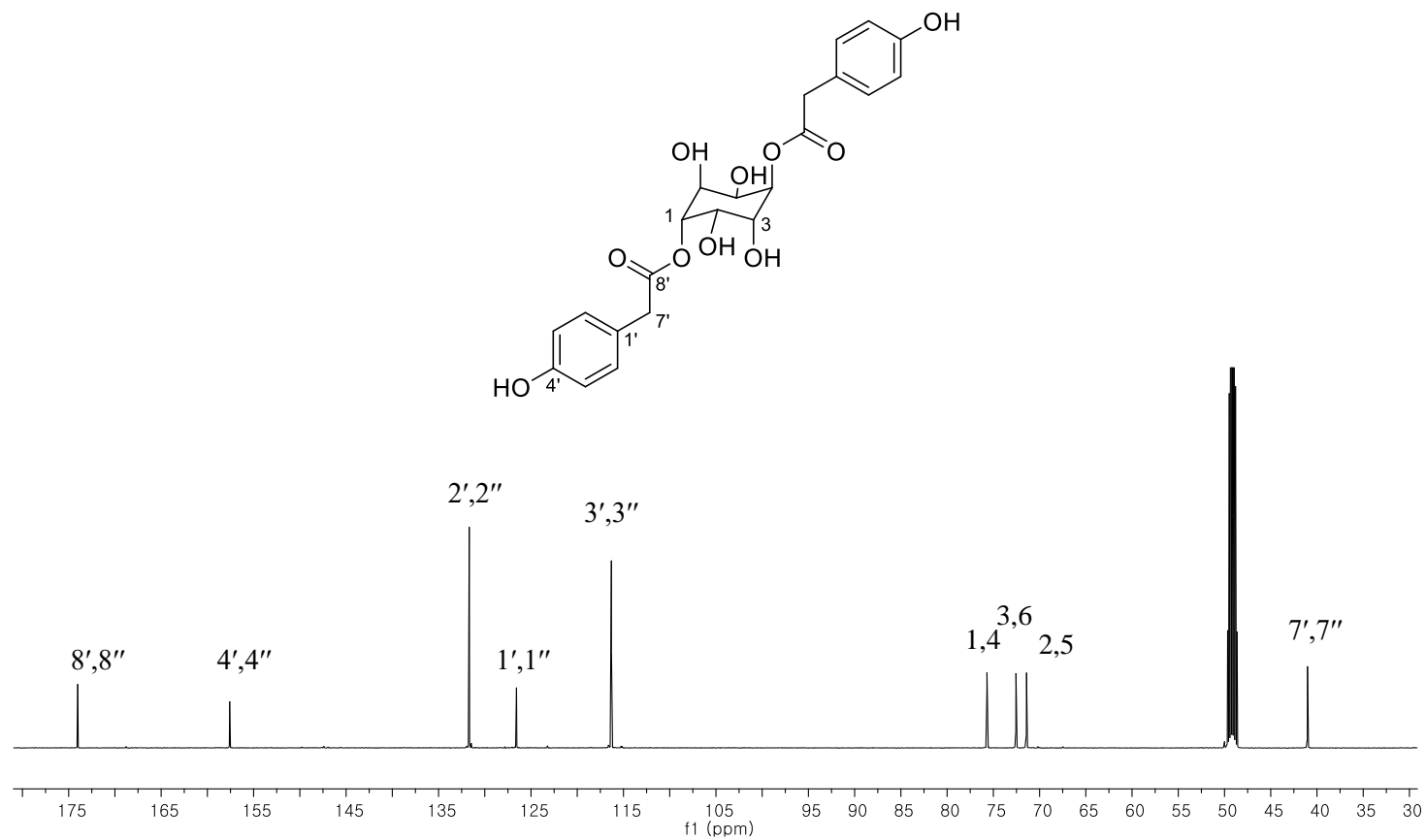


Fig. 59. ^{13}C -NMR spectrum of compound **13**

1.14 화합물 **14**의 구조

무색무정형인 화합물 **14**는 HRESIMS를 통하여 분자식 $C_{22}H_{24}O_{10}$ 을 동정하였다 [m/z 471.1288 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{22}H_{24}O_{10}Na$, 471.1267)]. 1H , ^{13}C NMR spectra를 통해 화합물 **13**과 흡사한 구조를 갖고 있지만, inositol의 입체구조가 다른 것을 알 수 있다. 1H NMR spectrum를 통해 두 개의 1,4-치환체 [δ_H 7.12 (2H, d, $J = 8.5$ Hz), 7.12 (2H, d, $J = 8.5$ Hz), 6.73 (2H, d, $J = 8.5$ Hz), 6.71 (2H, d, $J = 8.5$ Hz)], 두 개의 methylene기 [δ_H 3.63 (2H, d, $J = 3.6$ Hz), 3.60 (2H, overlap)], 하나의 cyclohexane [δ_H 5.10 (1H, t, $J = 9.5$ Hz), 5.14 (1H, t, $J = 3.3$ Hz), 3.94 (1H, dd, $J = 10.0, 3.0$ Hz), 3.80 (1H, t, $J = 3.3$ Hz), 3.60 (1H, overlap), 3.49 (1H, dd, $J = 10.0, 2.7$ Hz)]을 확인하였고, ^{13}C NMR spectrum에서 두 개의 aromatic 링 (δ_C 157.6, 157.6, 131.6, 131.6, 126.4, 126.2, 116.4, 116.3), 두 개의 carbonyl기 (δ_C 173.9, 173.3), 여섯 개의 oxygenated carbon (δ_C 76.9, 75.5, 73.1, 71.0, 70.8, 70.5)과 두 개의 methylene 피크 (δ_C 41.1, 40.9)을 확인하였다. Coupling constant를 통한 입체구조를 동정하였고, 문헌치와의 비교를 통해 화합물 **14**를 1D-1,4-di-*O*-4-hydroxyphenylacetyl-*chiro*-inositol로 동정하였다 (Kenny et al., 2014).

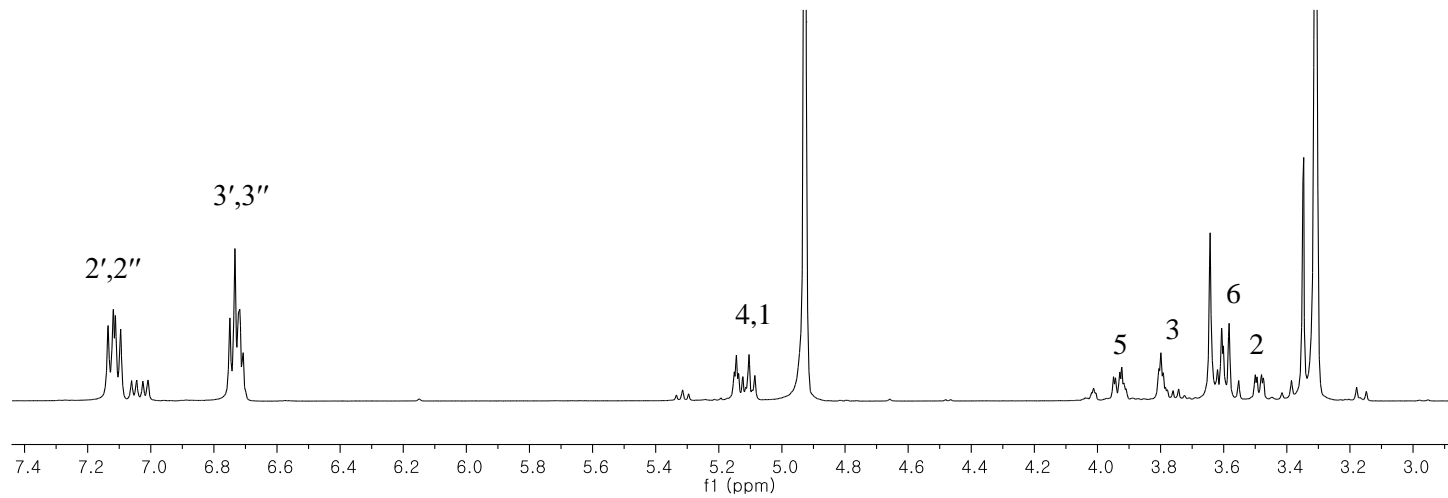
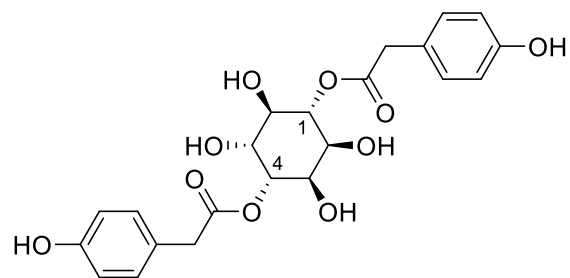


Fig. 60. ^1H -NMR spectrum of compound **14**

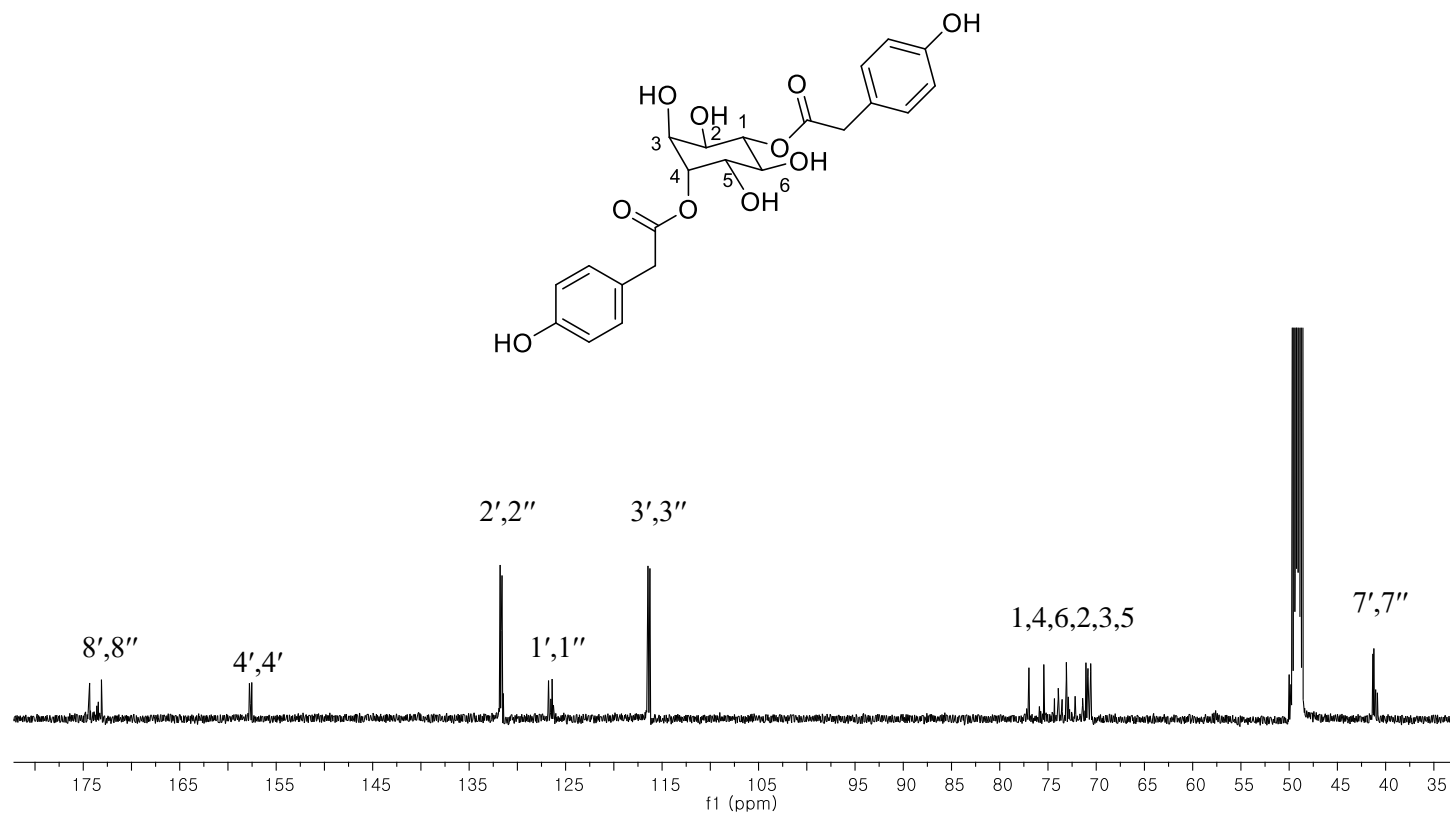


Fig. 61. ^{13}C -NMR spectrum of compound **14**

1.15 화합물 **15**의 구조

화합물 **15**번은 황색무정형 분말로 HRESIMS 값 [m/z 564.2091 $[M+H]^+$ (calcd. for $C_{27}H_{34}NO_{12}$, 564.2081)]을 통해 분자식 $C_{27}H_{33}NO_{12}$ 을 구하였다. 1H NMR spectrum에서 하나의 1,4-치환체와 하나의 aromatic signal [δ_H 7.06 (2H, d, J = 8.5 Hz), 6.67 (2H, d, J = 8.5 Hz), 6.32 (1H, s)], anomeric 피크 [δ_H 5.02 (1H, d, J = 7.6 Hz)], amino group [δ_H 4.37 (2H, s)], 5개 methylene 피크 [δ_H 2.86 (2H, t, J = 10.8 Hz), 3.42 (2H, m), 2.40 (1H, m), 2.16 (1H, m), 2.07 (1H, m), 1.91 (1H, m), 3.64 (1H, m), 3.21 (1H, m)]가 확인되었다. ^{13}C NMR spectrum에서는 하나의 ketone기 (δ_C 206.6), 하나의 carbonyl기 (δ_C 173.7), 2개의 aromatic ring (δ_C 167.7, 166.0, 162.4, 156.5, 134.0, 130.5, 116.2, 106.8, 98.4, 95.5), 당 하나 (δ_C 102.1, 78.6, 78.5, 74.8, 71.1, 62.5), 3개의 amino carbon (δ_C 69.8, 55.4, 48.4), 4개의 methylene 피크 (δ_C 47.1, 30.9, 30.3, 24.9)를 확인할 수 있다. COSY (H-7/H-8)와 HMBC (H-2/C-7, H-7/C-9, H-3'/C-1', C-2', C-4', C-5', H-1''/C-2) correlation 을 통해 chalcone 골격의 구조인 'phlorizin'의 존재를 추정 할 수 있다. 또한 COSY (H-3'''-4'''-5'''-6''')와 HMBC (H-1'''/C-3''', 6''', H-3'''/C-7''') correlation을 통해 부분구조 methylproline 구조를 동정할 수 있다. HMBC correlation H-1'''/C-4'와 C-6'를 통해 methylproline이 phlorizin 5' 위치에 결합되어 있음을 알 수 있다. 이상의 결과로 화합물 **15**를 5'-methylproline phlorizin으로 동정하였다.

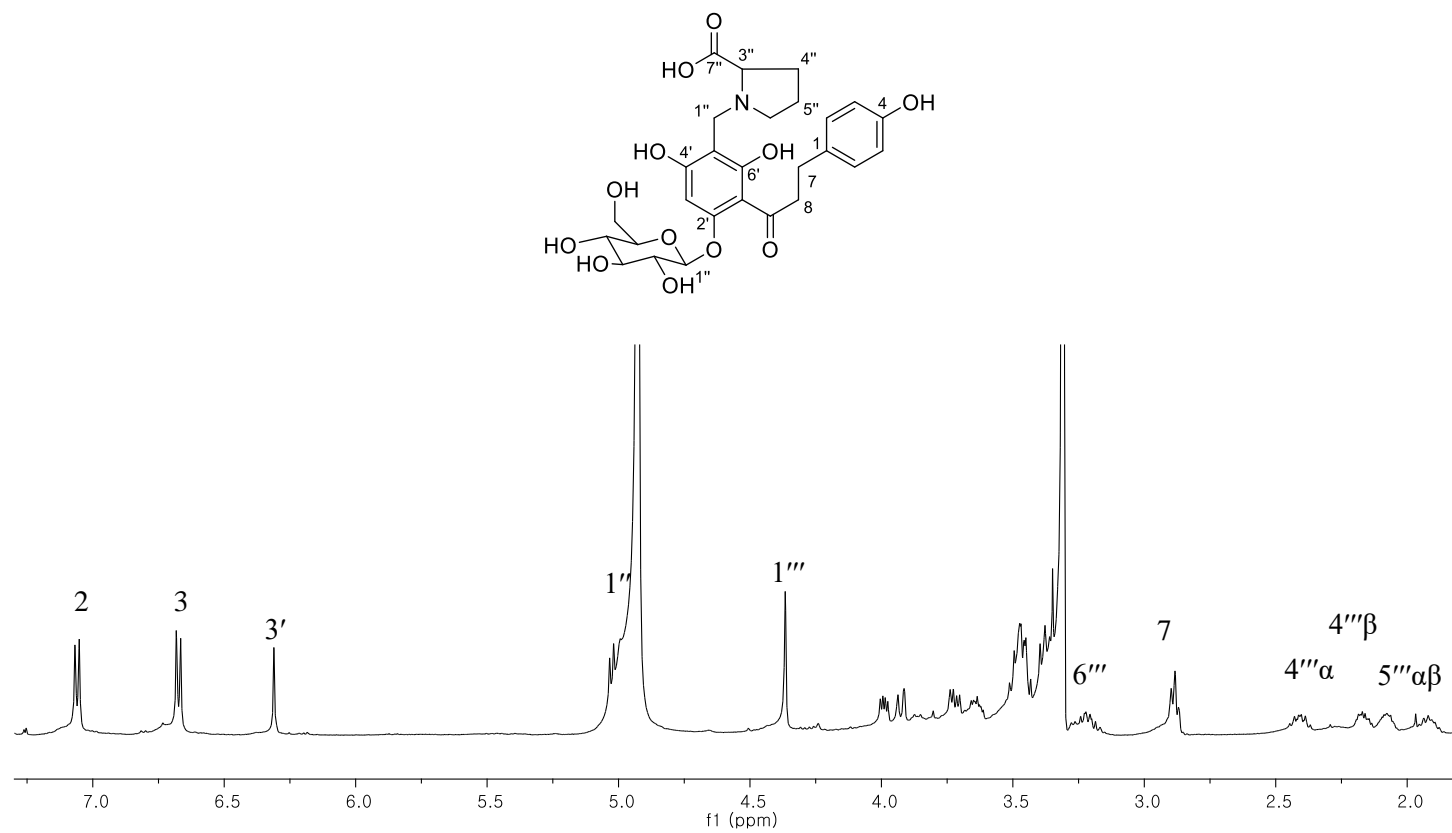


Fig. 62. ^1H -NMR spectrum of compound **15**

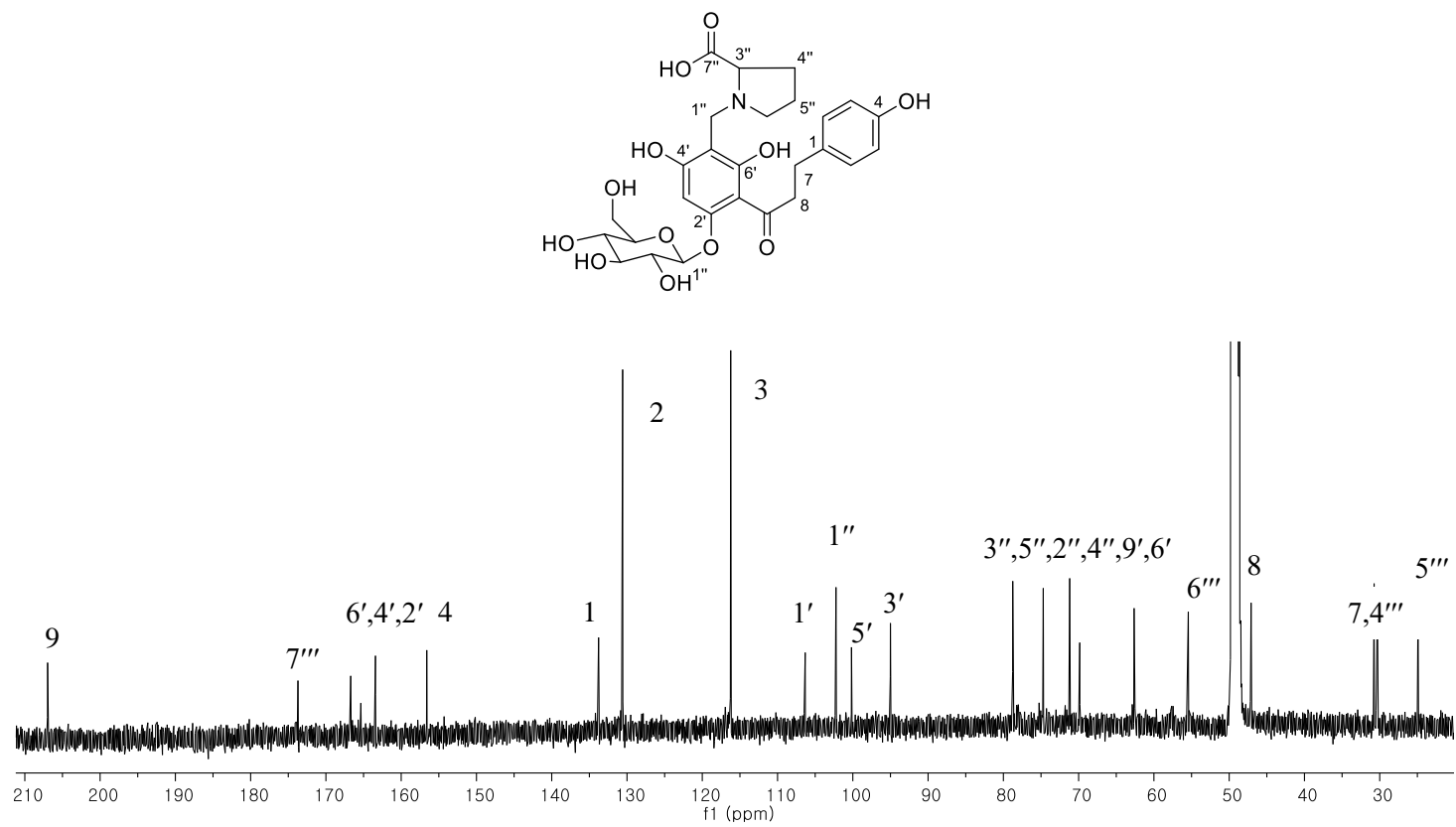


Fig. 63. ^{13}C -NMR spectrum of compound **15**

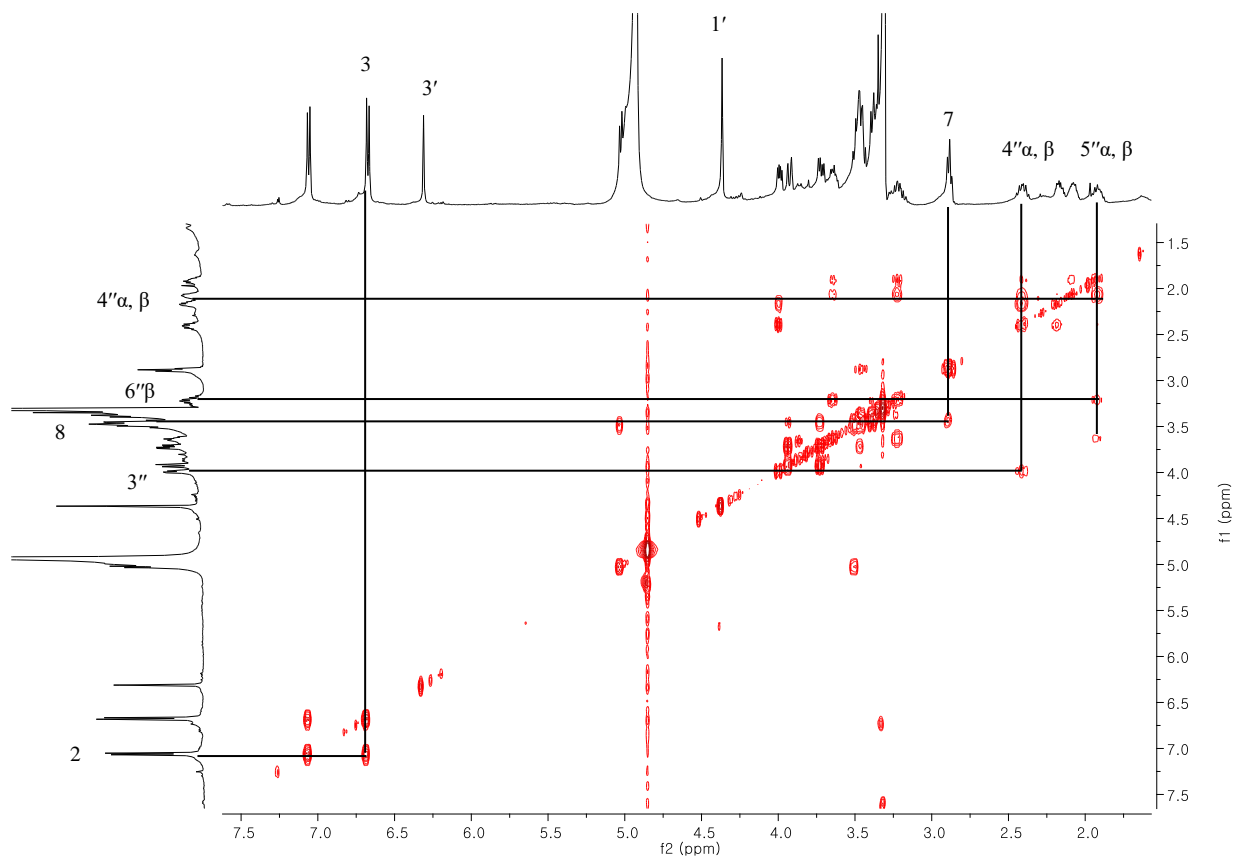


Fig. 64. ^1H - ^1H COSY spectrum of compound **15**

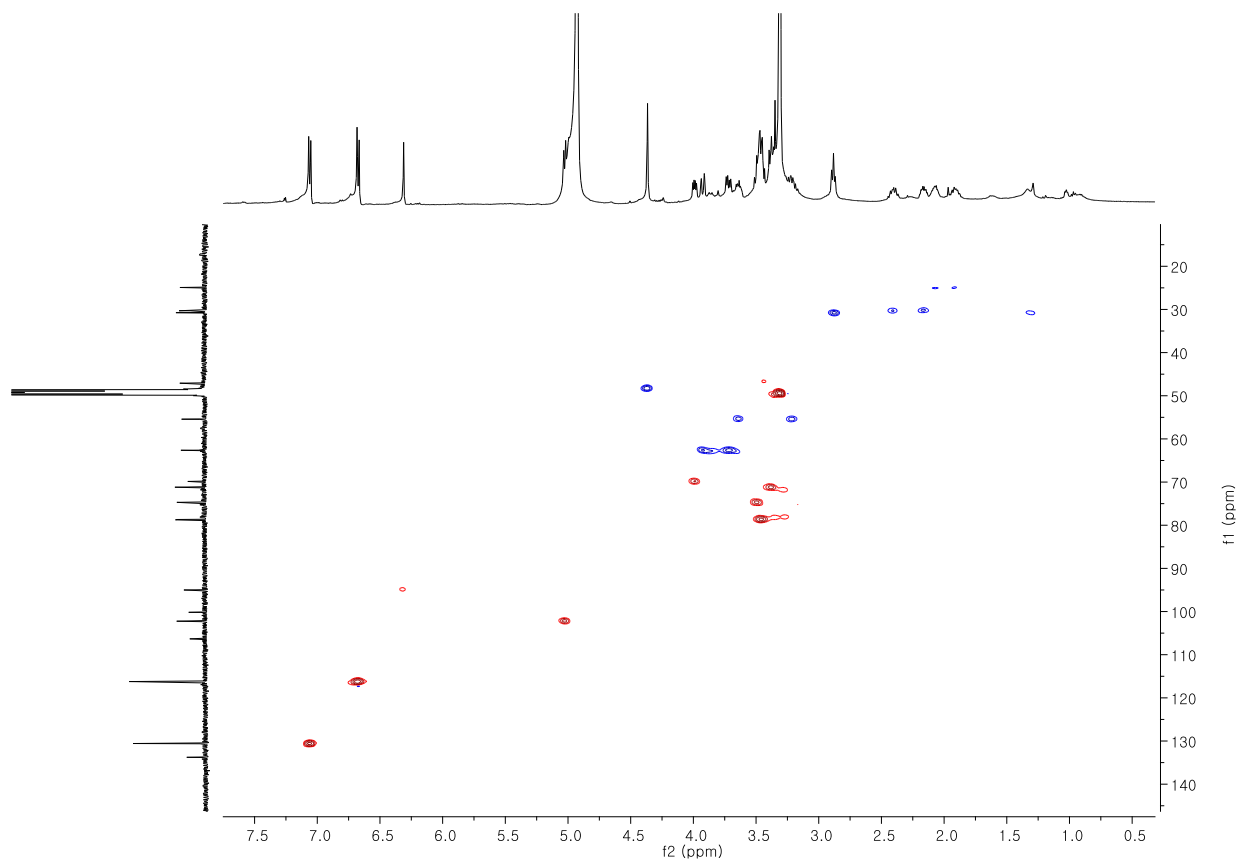


Fig. 65. HSQC spectrum of compound **15**

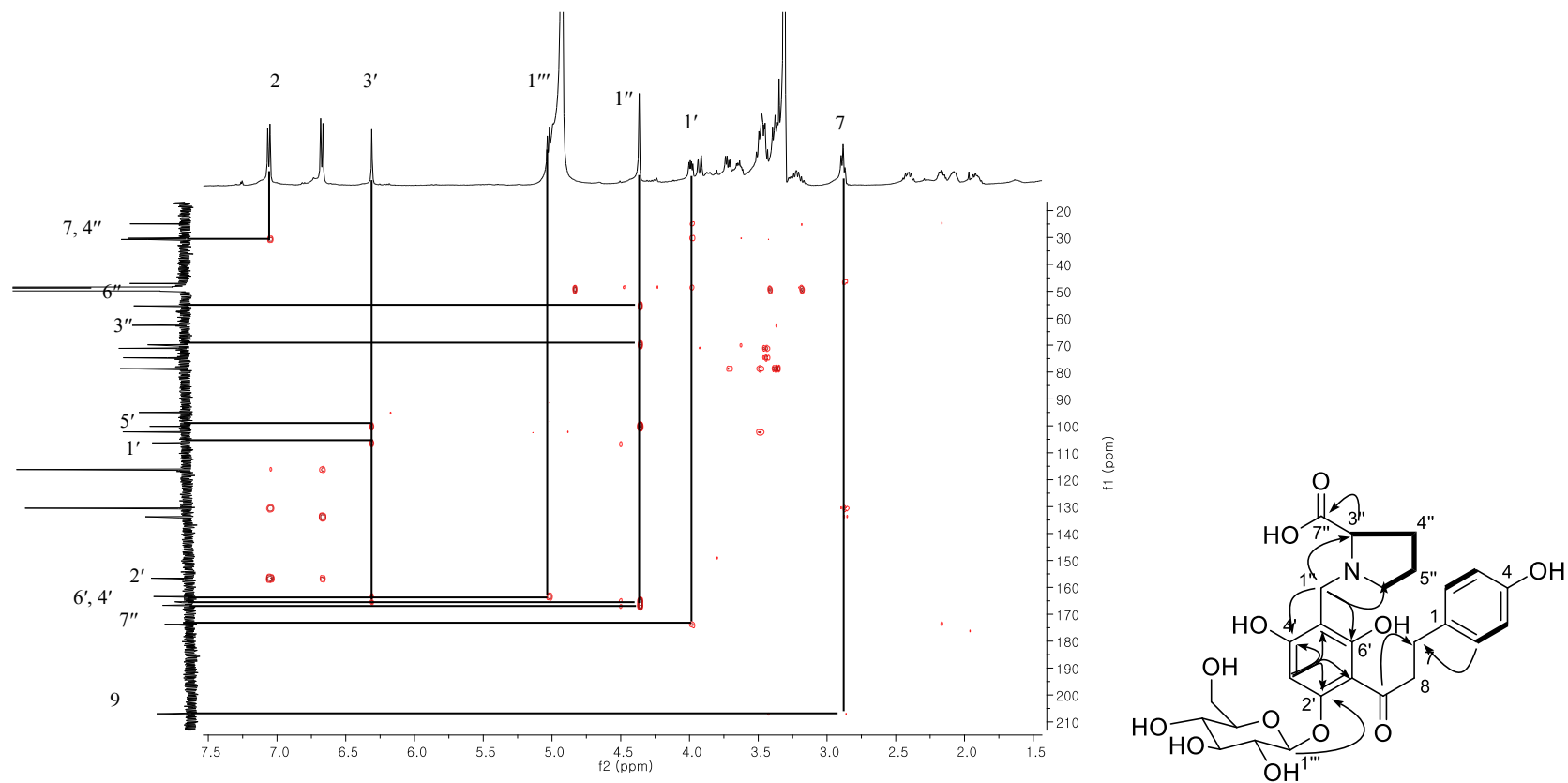


Fig. 66. HMBC spectrum of compound **15**

1.16 화합물 16, 17, 18, 19의 구조

황색무정형 분말인 화합물 16은 분자식이 $C_{16}H_{12}O_6$ 이다 [m/z 299.0567 $[M-H]^-$ (calcd. for $C_{16}H_{11}O_6$, 299.0556)]. 1H NMR spectrum에서 1,3,4-치환체 [δ_H 7.57 (1H, d, $J = 8.9$ Hz), 7.56 (1H, s), 6.93 (1H, dd, $J = 8.9, 2.1$ Hz)], 두 개의 *meta*-coupling proton [δ_H 6.51 (1H, s), 6.19 (1H, s)], 하나의 singlet 피크 [δ_H 6.91 (1H, s)] 그리고 methoxyl기 [δ_H 3.89 (3H, s)]를 확인할 수 있으며, 이를 토대로 하나의 methoxyl기를 갖는 플라보노이드 구조임을 추정할 수 있다. ^{13}C NMR spectrum과 문헌치와의 비교를 통해 화합물 16을 chrysoeriol로 동정하였다 (Ribeiro et al., 2013).

화합물 17 역시 황색무정형 화합물이며 MS 값 [m/z 329.0677 $[M-H]^-$ (calcd. for $C_{17}H_{13}O_7$, 329.0661)]을 통해 분자식 $C_{17}H_{14}O_7$ 을 얻었다. 1H NMR spectrum에서 δ_H 7.16 (2H, s), δ_H 6.92 (1H, s), 6.48 (1H, d, $J = 2.0$ Hz), 6.21 (1H, d, $J = 2.0$ Hz)와 두 개의 methoxyl기 (δ_H 3.88, 3.75)를 통해 두 개의 methoxyl기를 갖는 tricetin 구조를 추정할 수 있다. ^{13}C NMR spectrum과 문헌치와의 비교를 통해 화합물 17을 5,7,3'-hydroxy-4',5'-dimethoxy flavone로 동정하였다 (Rofi and Pomilio, 1985).

플라보노이드 화합물 18은 황색무정형 화합물이며 HRESIMS [m/z 353.0635 (calcd. for $C_{17}H_{14}O_7Na$, 353.0637)]를 통하여 분자식 $C_{17}H_{14}O_7$ 을 얻었다. 1H , ^{13}C NMR spectra가 화합물 17과 거의 유사한 것으로 보인다. 차이점이 있다면 두 개의 methoxyl기가 대칭으로 존재하는 것인데,

^1H NMR spectrum에서 δ_{H} 7.34 (2H, s), δ_{H} 7.00 (1H, s), 6.58 (1H, s), 6.22 (1H, s) 와 3.90 (3H, s) $\times 2$ 를 통해 tricetin에 3', 5'위치에 methoxyl기가 있는 것으로 추정할 수 있다. 이를 토대로 문헌치와 비교를 통하여 화합물 **18**을 5,7,4'-hydroxy-3',5'-dimethoxy flavone로 동정하였다 (Dong et al., 2011).

화합물 **19**는 황색무정형 화합물이며 HRESIMS 값 [m/z 285.0411 [M-H^-] (calcd. for $\text{C}_{15}\text{H}_9\text{O}_6$, 285.0399)]을 통해 분자식 $\text{C}_{15}\text{H}_{10}\text{O}_7$ 을 구하였다. NMR spectra가 화합물 **16**과 유사하나, ^1H NMR spectrum에서 δ_{H} 7.41 (1H, dd, $J = 8.4, 2.3$ Hz), 7.41 (1H, d, $J = 8.4$ Hz), 7.40 (1H, s), 6.66 (1H, s), 6.44 (1H, d, $J = 2.1$ Hz), 6.18 (1H, d, $J = 2.1$ Hz)을 통해 methoxyl기가 없다는 것을 발견할 수 있다. 문헌과의 비교를 통해 화합물 **19**가 luteolin 인 것을 알 수 있다 (Chaturvedula and Prakash, 2013).

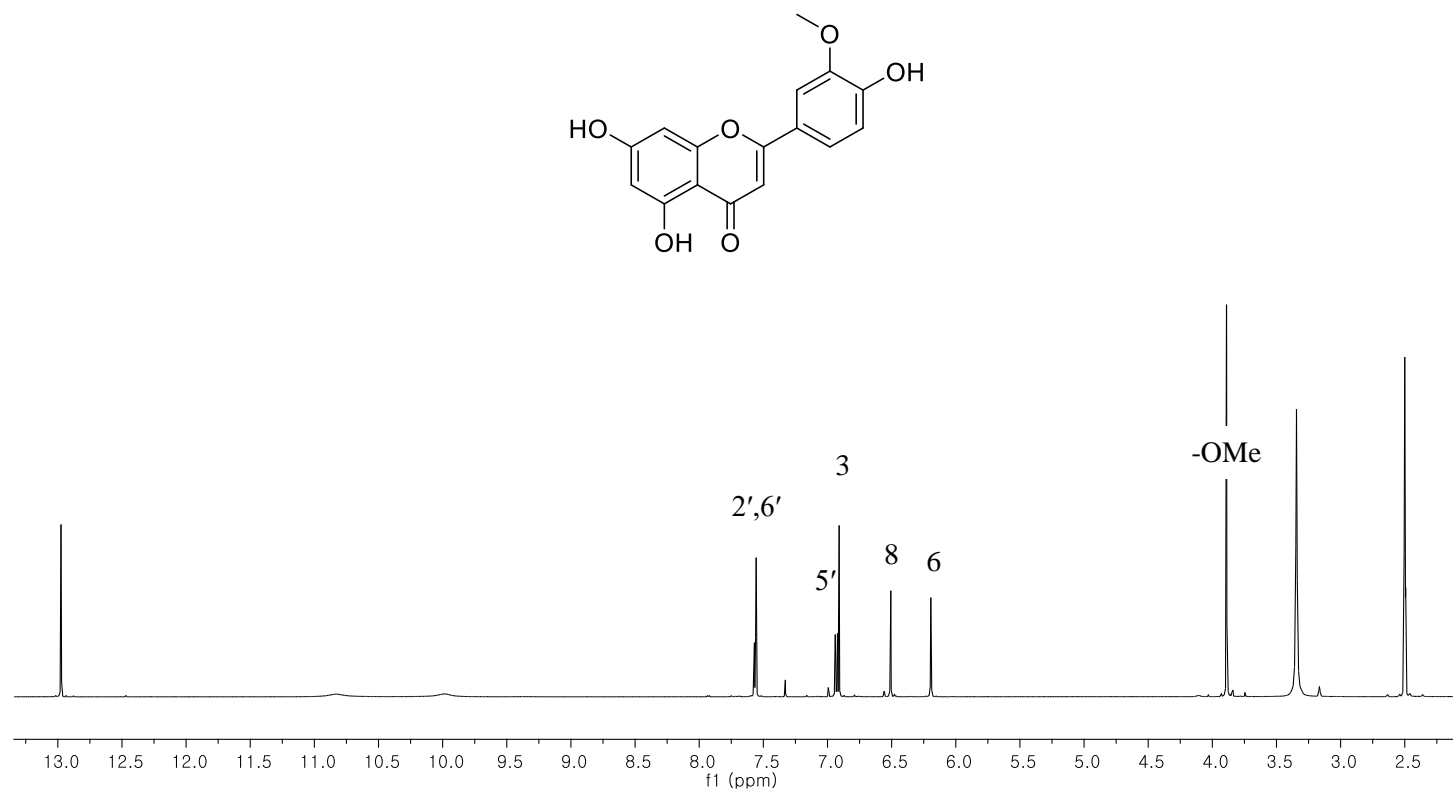


Fig. 67. ^1H -NMR spectrum of compound **16**

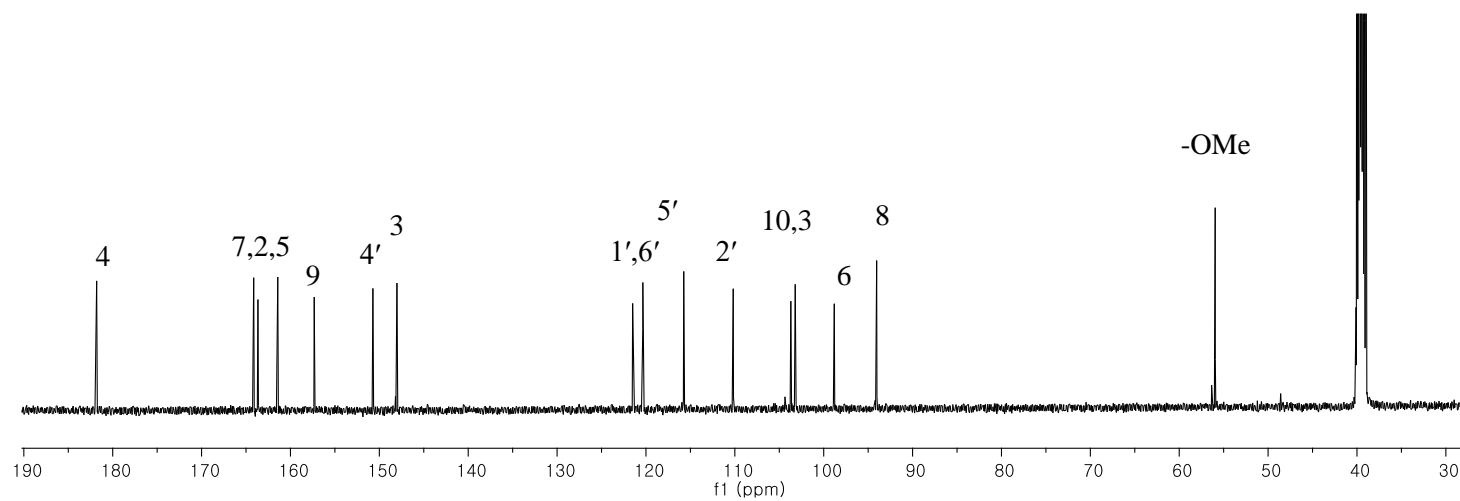
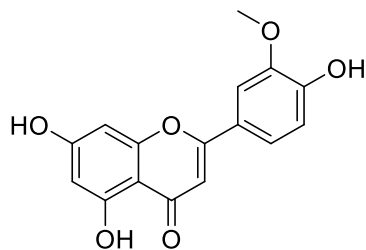


Fig. 68. ^{13}C -NMR spectrum of compound **16**

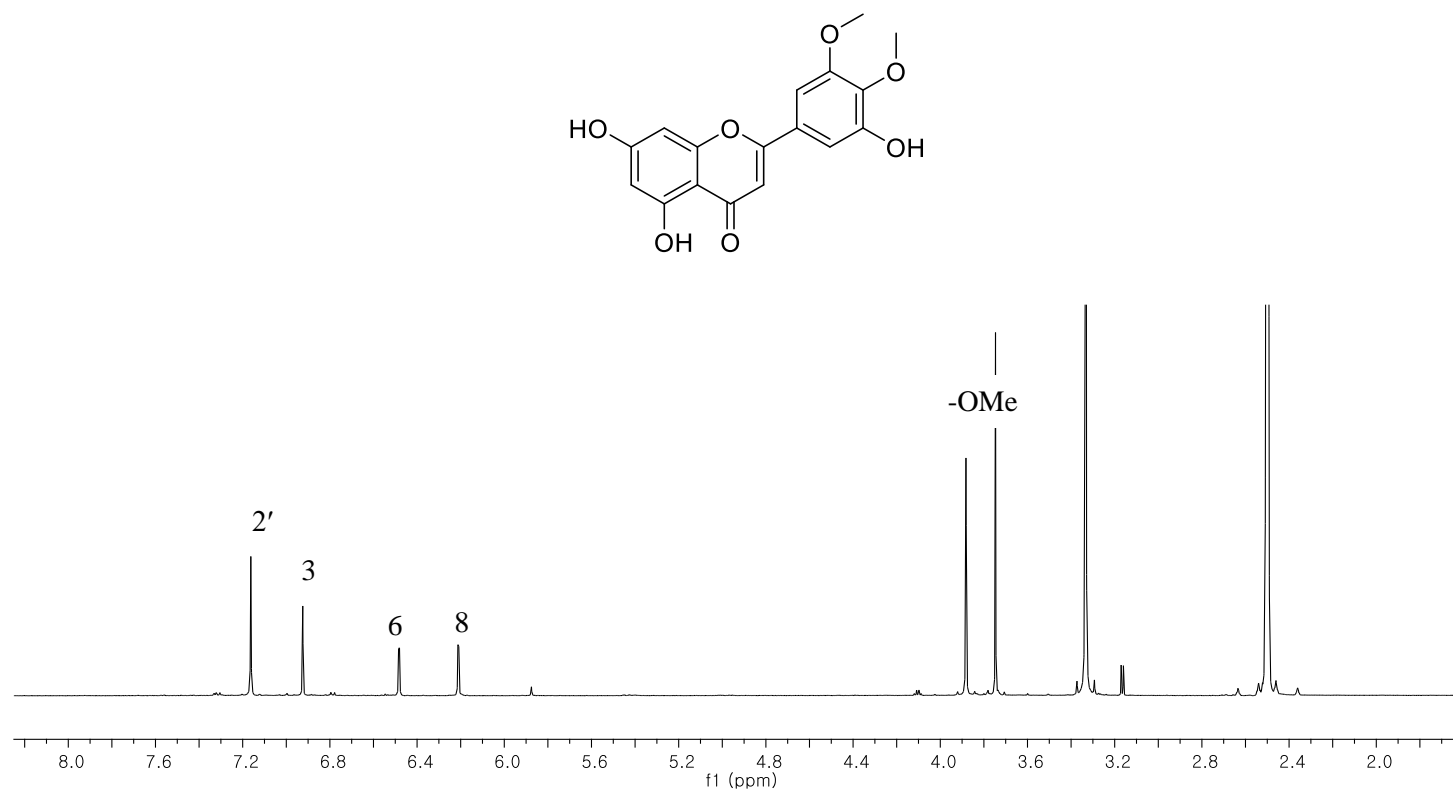


Fig. 69. ^1H -NMR spectrum of compound **17**

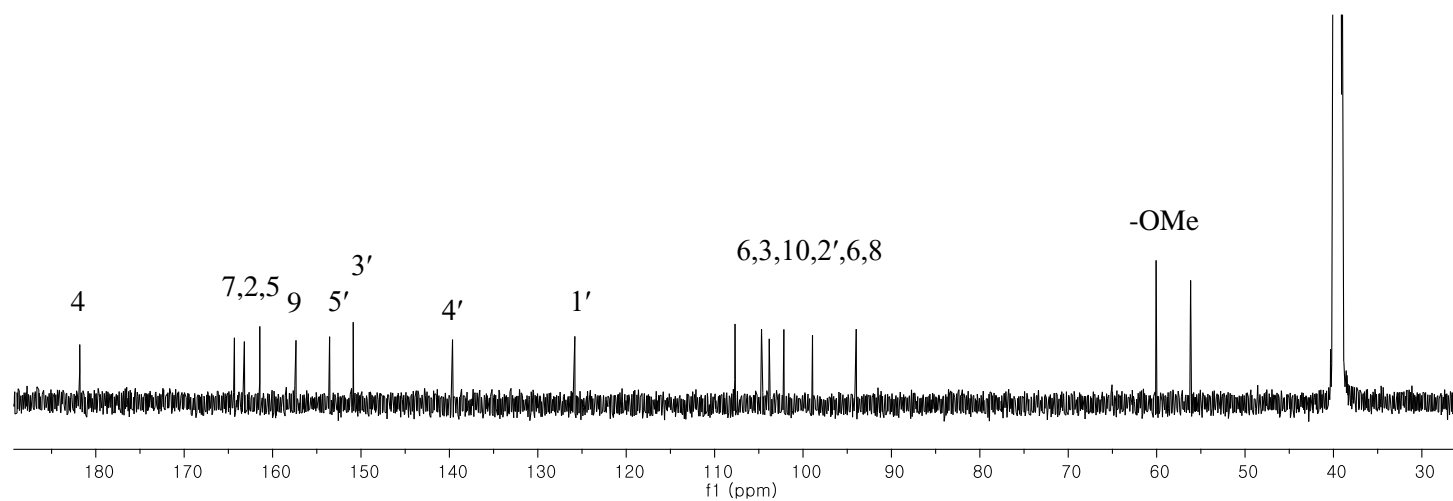
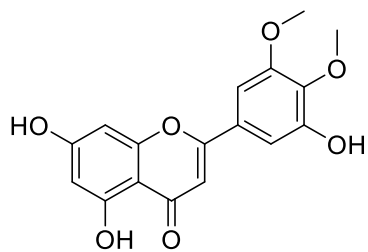


Fig. 70. ^{13}C -NMR spectrum of compound **17**

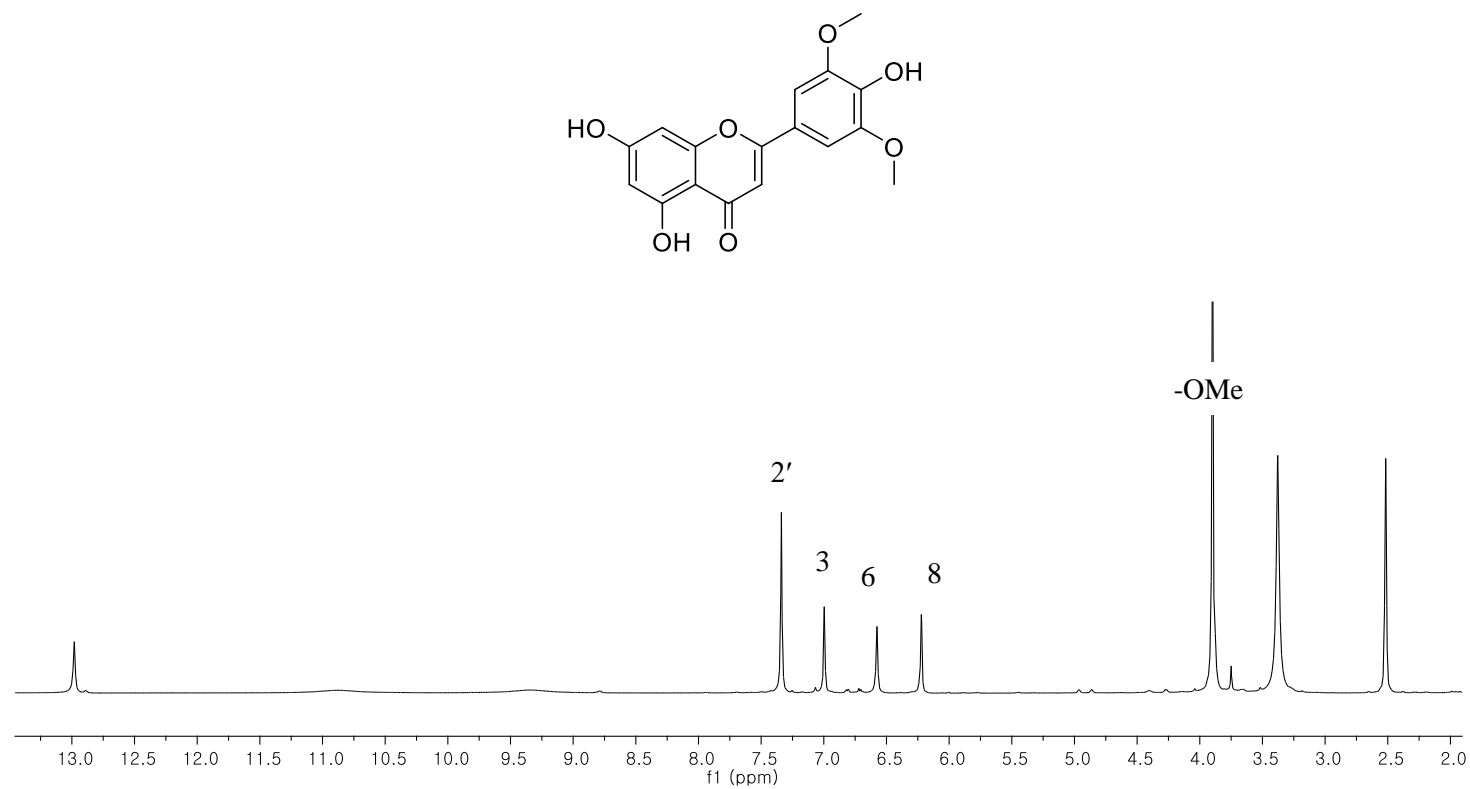


Fig. 71. ^1H -NMR spectrum of compound **18**

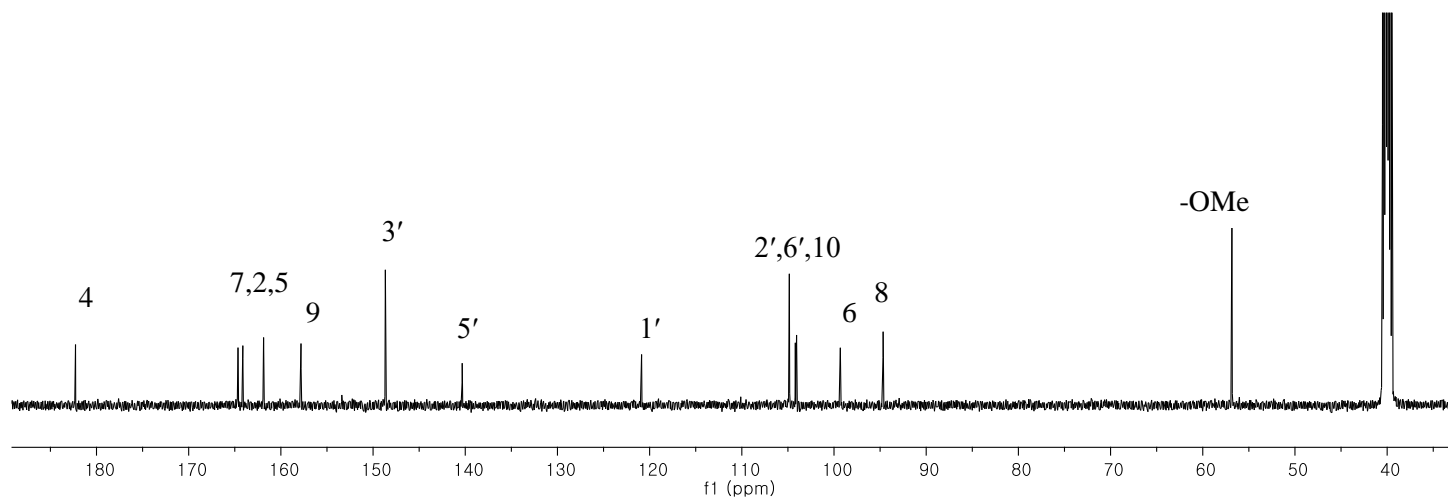
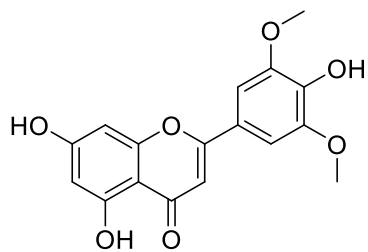


Fig. 72. ^{13}C -NMR spectrum of compound **18**

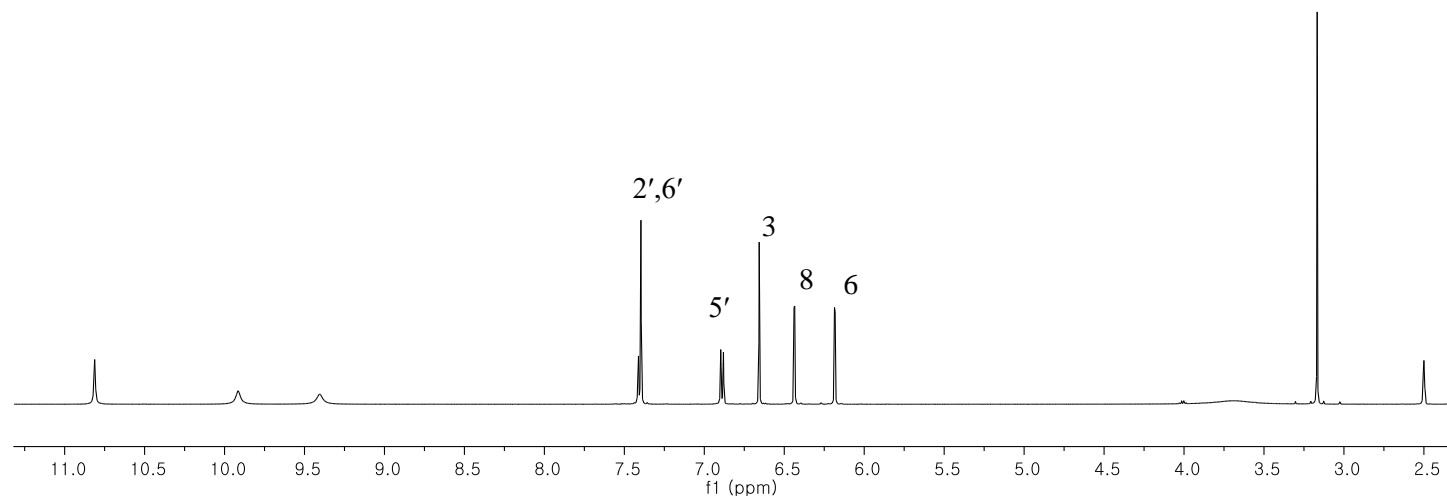
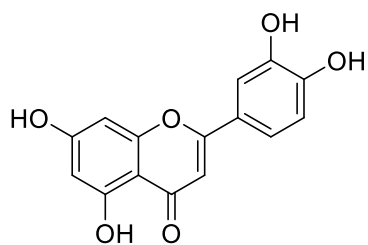


Fig. 73. ^1H -NMR spectrum of compound **19**

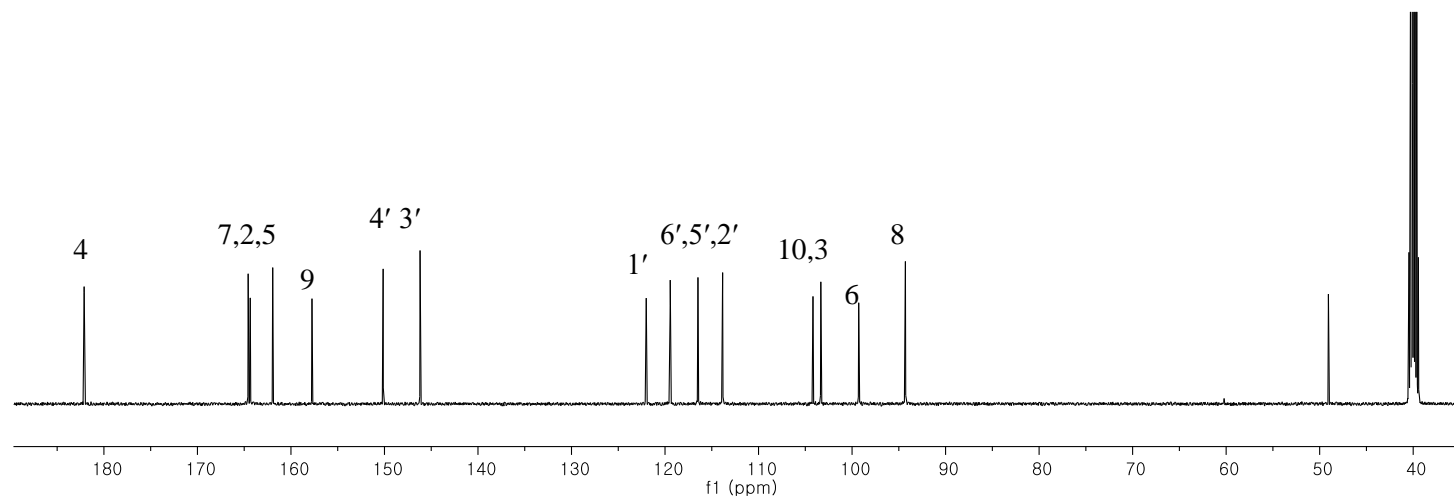
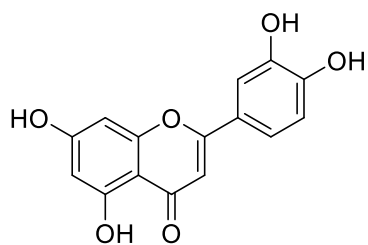


Fig. 74. ^{13}C -NMR spectrum of compound **19**

1.17 화합물 **20**, **23**의 구조

화합물 **20** 는 황색무정형분말 화합물로서 HRESIMS 값 [m/z 497.1465 [M-H]⁻ (calcd. for C₂₆H₂₃O₁₀, 497.1448)]을 통하여 분자식 C₂₆H₂₄O₁₀ 을 얻었다. 1D NMR spectra 가 화합물 **18** 과 유사하며 ¹H NMR spectrum 에서 δ_H 7.31 (2H, s), δ_H 7.05 (1H, s), 6.58 (1H, d, J = 1.8 Hz), 6.22 (1H, d, J = 1.8 Hz) 와 3.87 (3H, s)×2 를 통해 5,7,4'-hydroxy-3',5'-dimethoxy flavone 부분구조의 존재를 알 수 있다. 추가적으로 1, 4-치환체 [δ_H 7.16 (2H, d, J = 8.4 Hz), 6.69 (2H, d, J = 8.4 Hz)] 그리고 4 개의 oxygenated proton [δ_H 4.78 (1H, t, J = 4.9 Hz), 4.31 (1H, dd, J = 8.8, 4.9 Hz), 3.72 (1H, m), 3.48 (1H, m)]이 발견된다. 2D NMR spectra 에 의해 4-hydroxyphenylpropanol 부분구조를 동정할 수 있으며, HMBC correlation (H-8''/C-4')에 의해 연결고리를 확인하였다. 그리고 H-7''의 coupling constant (J = 4.4 Hz)로 입체구조가 *erythro* 형태임을 알 수 있으며, 이상의 데이터와 문헌과의 비교를 통해 화합물 **20** 을 tricin 4'-O-[*erythro*-(4-hydroxyphenyl)propane] ether 로 동정하였다 (Chang et al., 2010).

화합물 **23** 은 **20** 과 같은 황색무정형 분말형태의 플라보노이드이며, 분자식도 같은 C₂₆H₂₄O₁₀ 이다 [HRESIMS m/z 497.1465 [M-H]⁻ (calcd. for C₂₆H₂₃O₁₀, 497.1448)]. 1D NMR spectra 가 화합물 **20** 과 거의 똑같으며 ¹H NMR spectrum 에서 δ_H 7.31 (2H, s), δ_H 7.05 (1H, s), 6.58 (1H, d, J = 1.8 Hz), 6.22 (1H, d, J = 1.8 Hz), 3.87 (3H, s)×2 를 통해 5,7,4'-hydroxy-3',5'-dimethoxy flavone 부분구조의 존재를 알 수 있으며 4-hydroxyphenylpropanol

부분구조 [δ_{H} 7.16 (2H, d, $J = 8.4$ Hz), 6.69 (2H, d, $J = 8.4$ Hz), 4.78 (1H, t, $J = 4.9$ Hz), 4.31 (1H, dd, $J = 8.8, 4.9$ Hz), 3.72 (1H, m), 3.48 (1H, m)]의 존재를 알 수 있다. 화합물 **20** 과의 차이점은 H-7''의 coupling constant ($J = 8.4$ Hz)값이다. 이는 입체구조 형태가 *threo* 형태이며, 이상의 데이터와 문헌치와의 비교를 통해 화합물 **23** 이 tricin 4'-O-[*threo*-(4-hydroxyphenyl) propane] ether 임을 알 수 있다 (Chang et al., 2010).

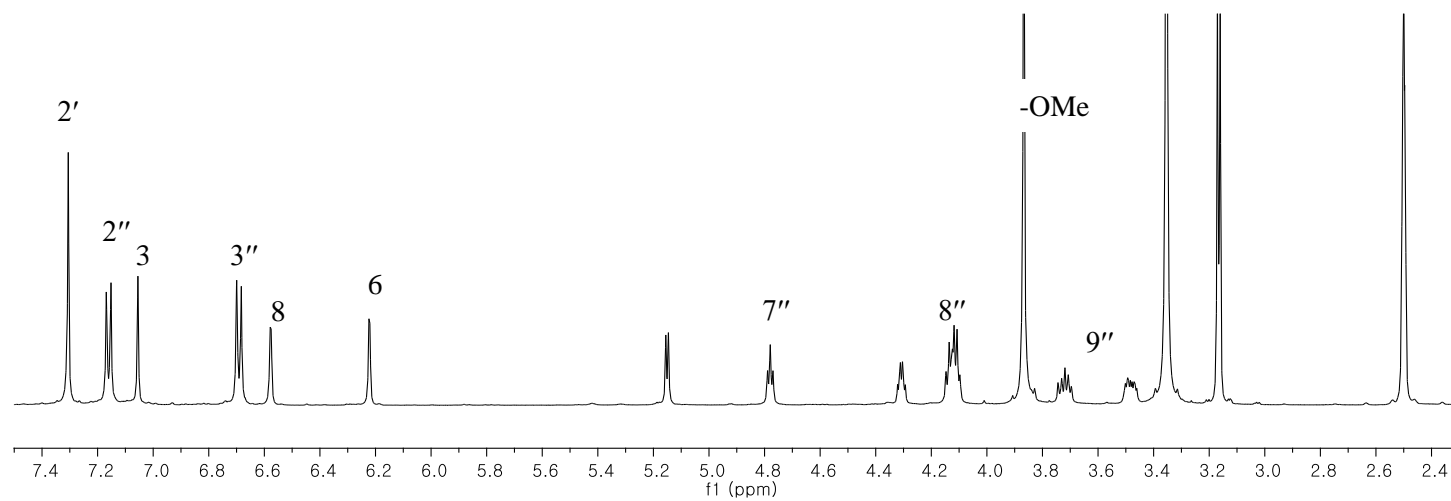
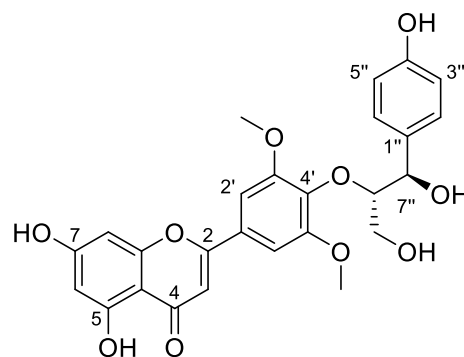


Fig. 75. ^1H -NMR spectrum of compound **20**

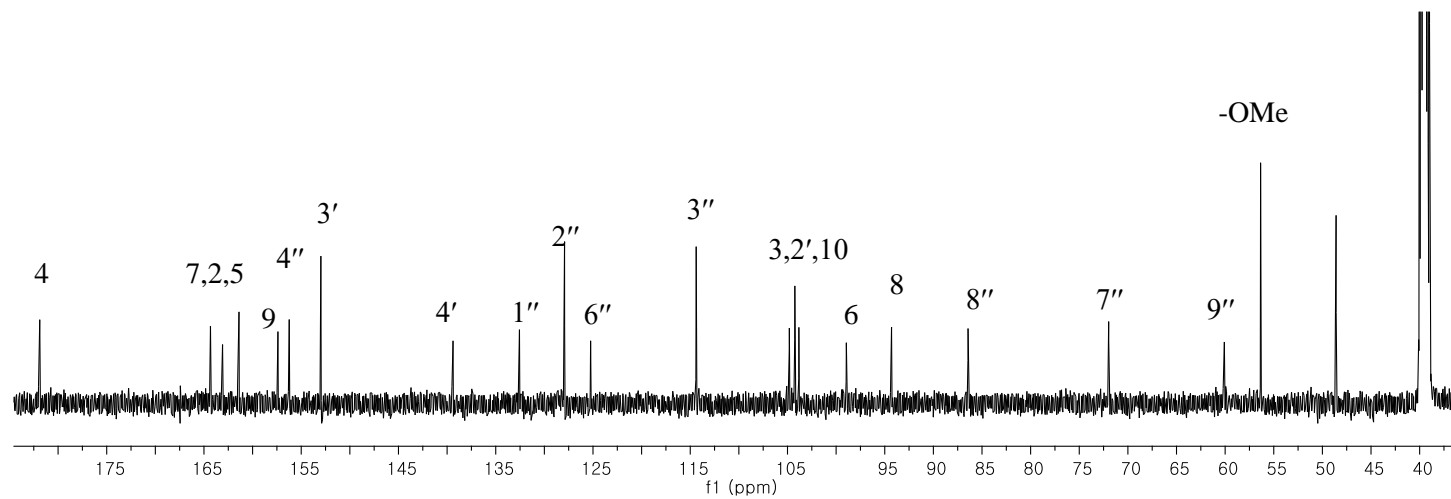
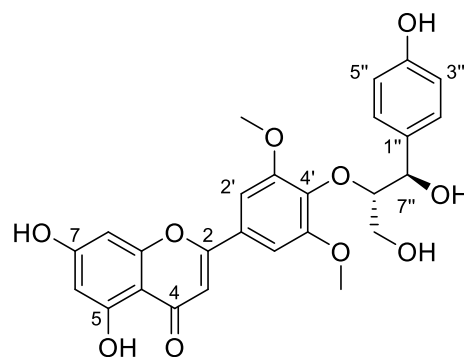


Fig. 76. ^{13}C -NMR spectrum of compound **20**

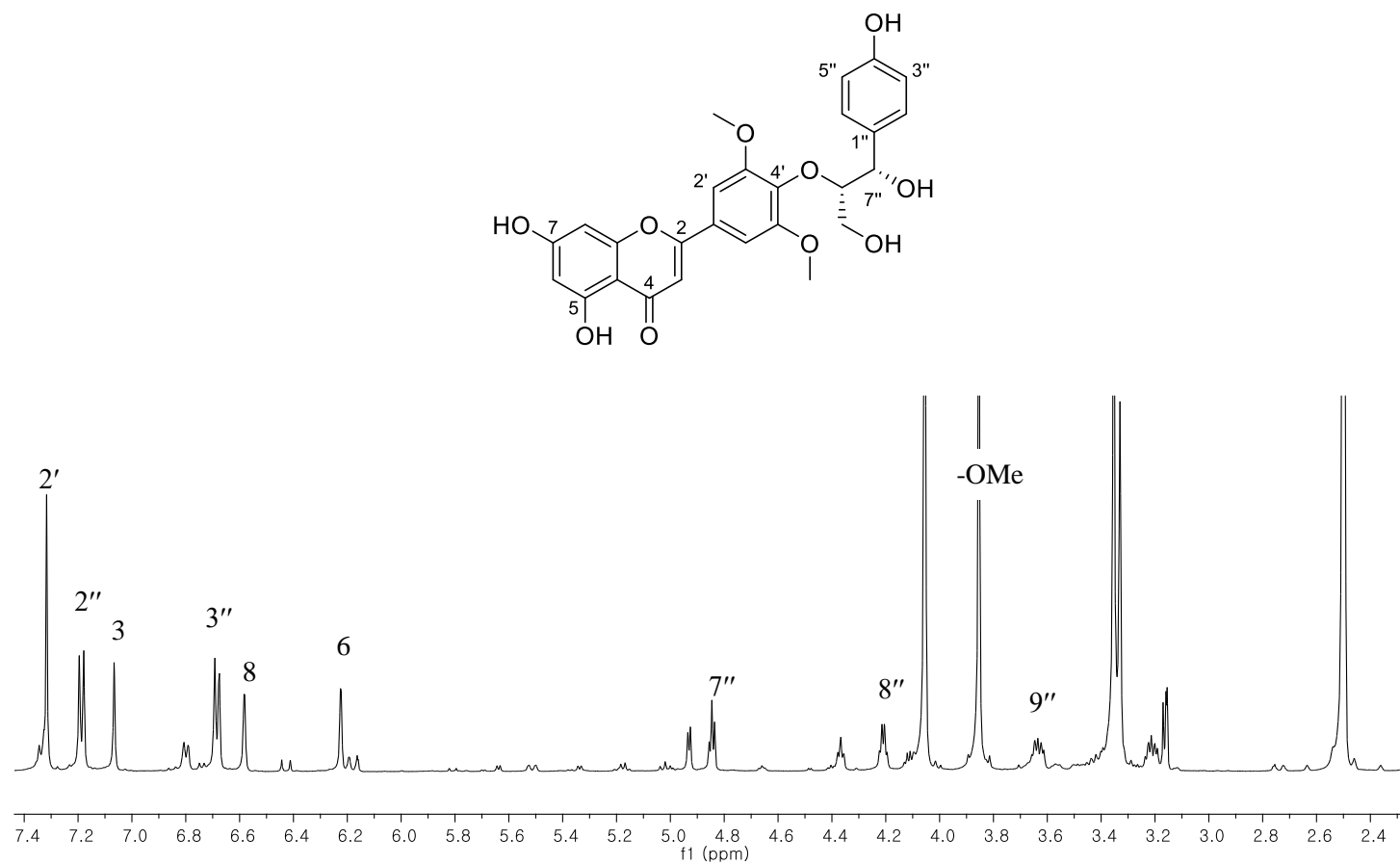


Fig. 77. ^1H -NMR spectrum of compound **23**

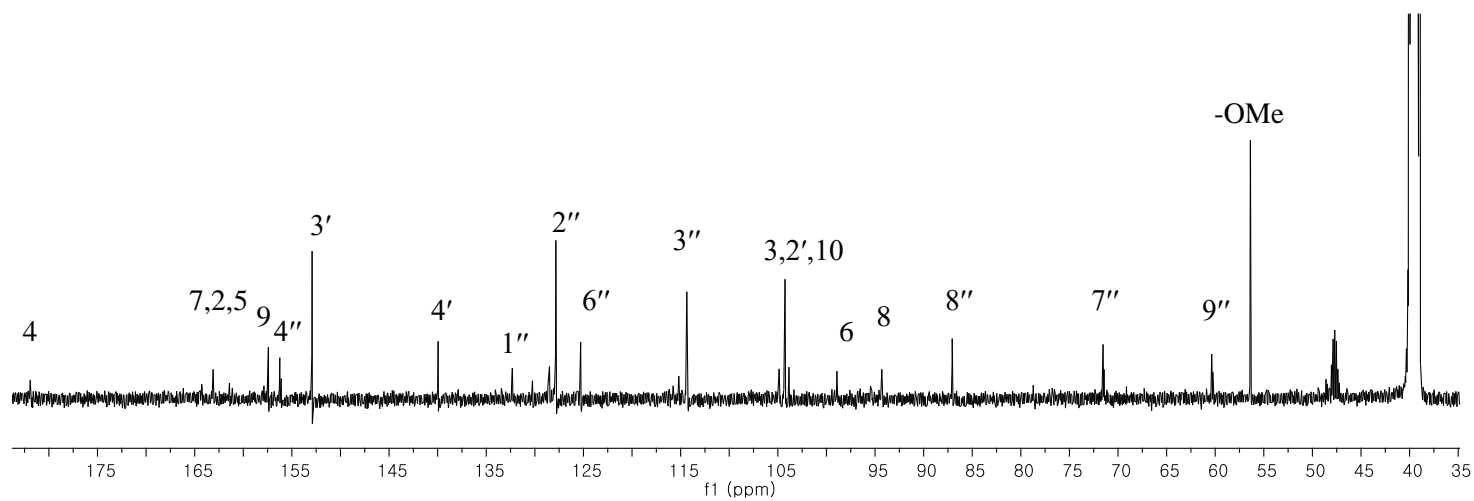
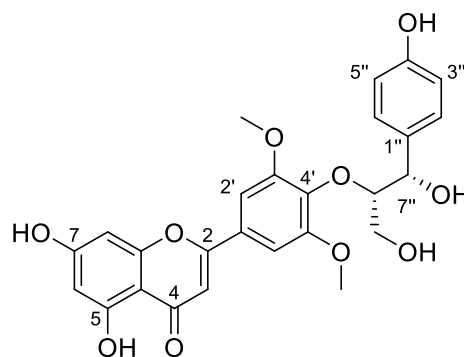


Fig. 78. ^{13}C -NMR spectrum of compound **23**

1.18 화합물 **21**, **22**의 구조

화합물 **21** 은 황색무정형 화합물로 분자식이 $C_{28}H_{28}O_{11}$ 이다 [m/z 563.1520 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{28}H_{28}O_{11}Na$, 563.1529)]. 1D NMR spectra 가 화합물 **20** 과 거의 유사하나, 1H NMR spectrum 에서 δ_H 7.31 (2H, s), δ_H 7.06 (1H, s), 6.58 (1H, s), 6.23 (1H, s)과 3.86 (3H, s) $\times 2$ 를 통해 5,7,4'-hydroxy-3',5'-dimethoxy flavone 부분구조와 1,3,4-치환체 [δ_H 6.85 (1H, s), 6.73 (2H, m)], 세 개의 oxygenated proton [δ_H 4.42 (1H, d, $J = 6.2$ Hz), 4.28 (1H, dd, $J = 10.5, 4.9$ Hz), 3.56 (1H, m), 3.17 (1H, d, $J = 4.7$ Hz)], 두 개의 methoxyl 기 [δ_H 3.74 (3H, s), 3.06 (3H, s)]를 추가적으로 확인할 수 있다. 2D NMR spectra 를 통해 부분구조 guaiacyl-(7''-O-methyl)-glycerol 을 동정할 수 있으며, HMBC correlation (H-8''/C-4')을 통하여 연결을 하였다. Glycerol 의 입체구조는 H-7''의 coupling constant ($J = 6.2$ Hz)를 통하여 *threo* 형태임을 알 수 있다. 따라서 화합물 **21** 의 구조를 문헌치와 비교하여 tricin 4'-O-[*threo*- β -guaiacyl-(7''-O-methyl)-glyceryl] ether 로 동정하였다 (Bai et al., 2015).

화합물 **22** 역시 황색분말의 플라보노이드이며, 분자식은 $C_{28}H_{28}O_{11}$ 이다 [m/z 563.1519 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{28}H_{28}O_{11}Na$, 563.1529)]. 1D NMR spectra 가 화합물 **21** 과 거의 똑같으며 1H NMR spectrum 에서 5,7,4'-hydroxy-3',5'-dimethoxy flavone [δ_H 7.31 (2H, s), δ_H 7.06 (1H, s), 6.58 (1H, s), 6.23 (1H, s), 3.86 (3H, s) $\times 2$]과 guaiacyl-(7''-O-methyl)-glycerol [δ_H 6.86 (1H, s), 6.72 (1H, m), 6.68 (1H, d, $J = 8.4$ Hz), 4.42 (1H, d, $J = 6.2$ Hz), 4.28 (1H, dd, $J = 10.5,$

4.9 Hz), 3.74 (3H, s), 3.56 (1H, m), 3.17 (1H, d, $J = 4.7$ Hz), 3.06 (3H, s)]을 확인할 수 있다. 화합물 **21** 과 다른 점은 glycerol 의 입체구조 형태이다. H-7'' 의 coupling constant ($J = 3.8$ Hz)에 의해 *erythro* 형태임을 동정할 수 있으며, 따라서 화합물 **22** 을 tricin 4'-*O*-[*erythro*- β -guaiacyl-(7''-*O*-methyl)-glyceryl] ether 로 문헌과의 비교를 통해 확인하였다 (Bai et al., 2015).

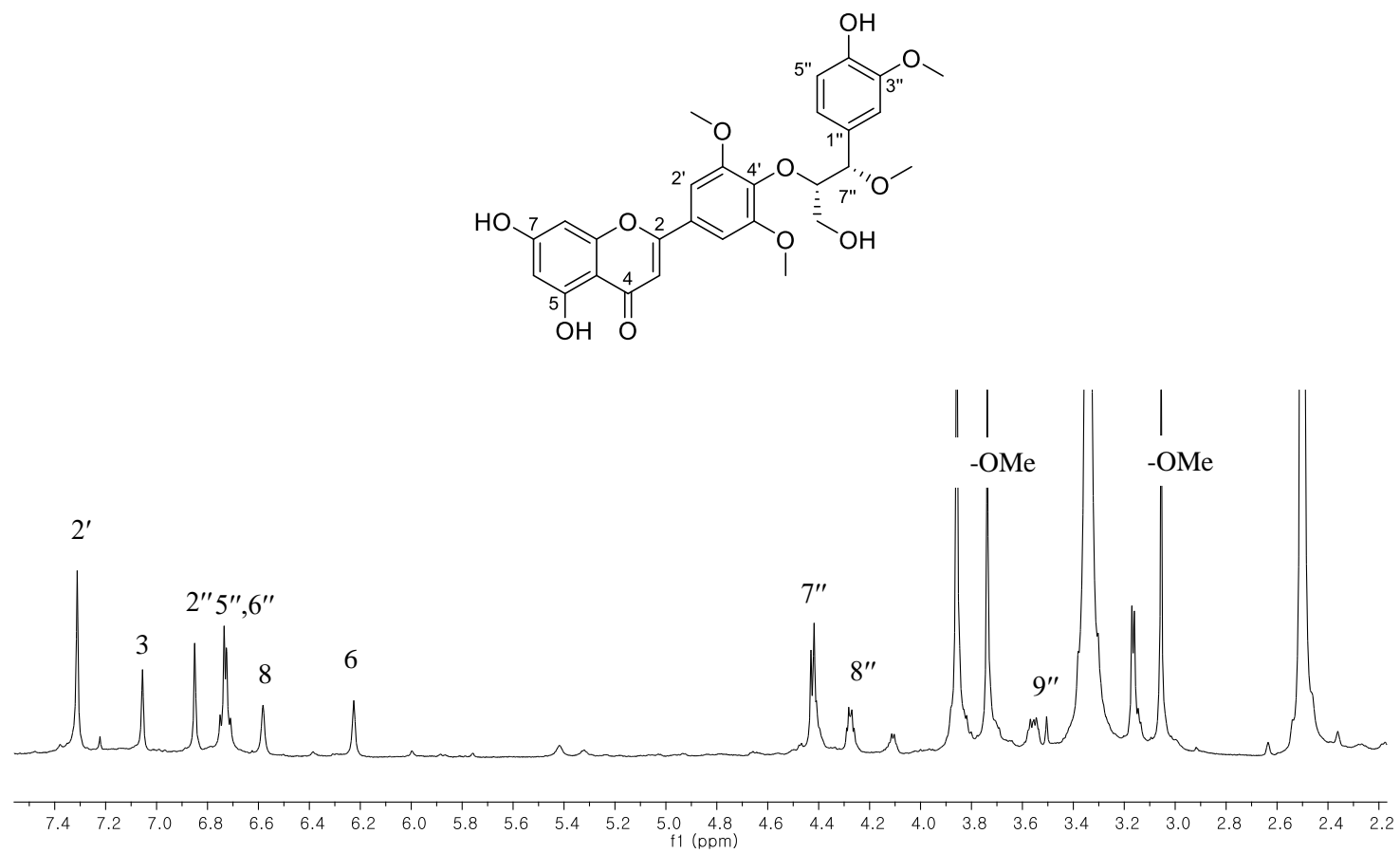


Fig. 79. ^1H -NMR spectrum of compound **21**

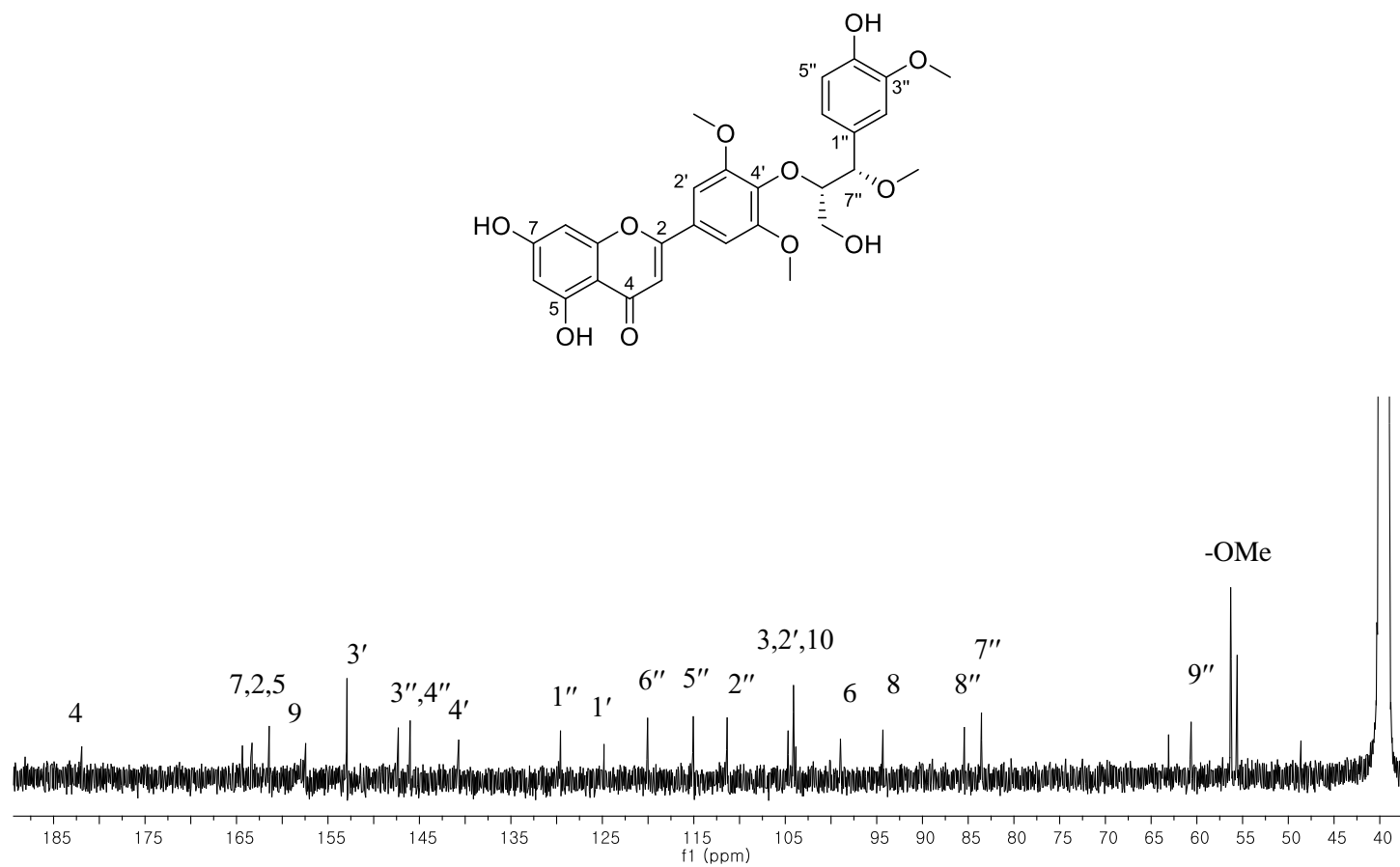


Fig. 80. ^{13}C -NMR spectrum of compound **21**

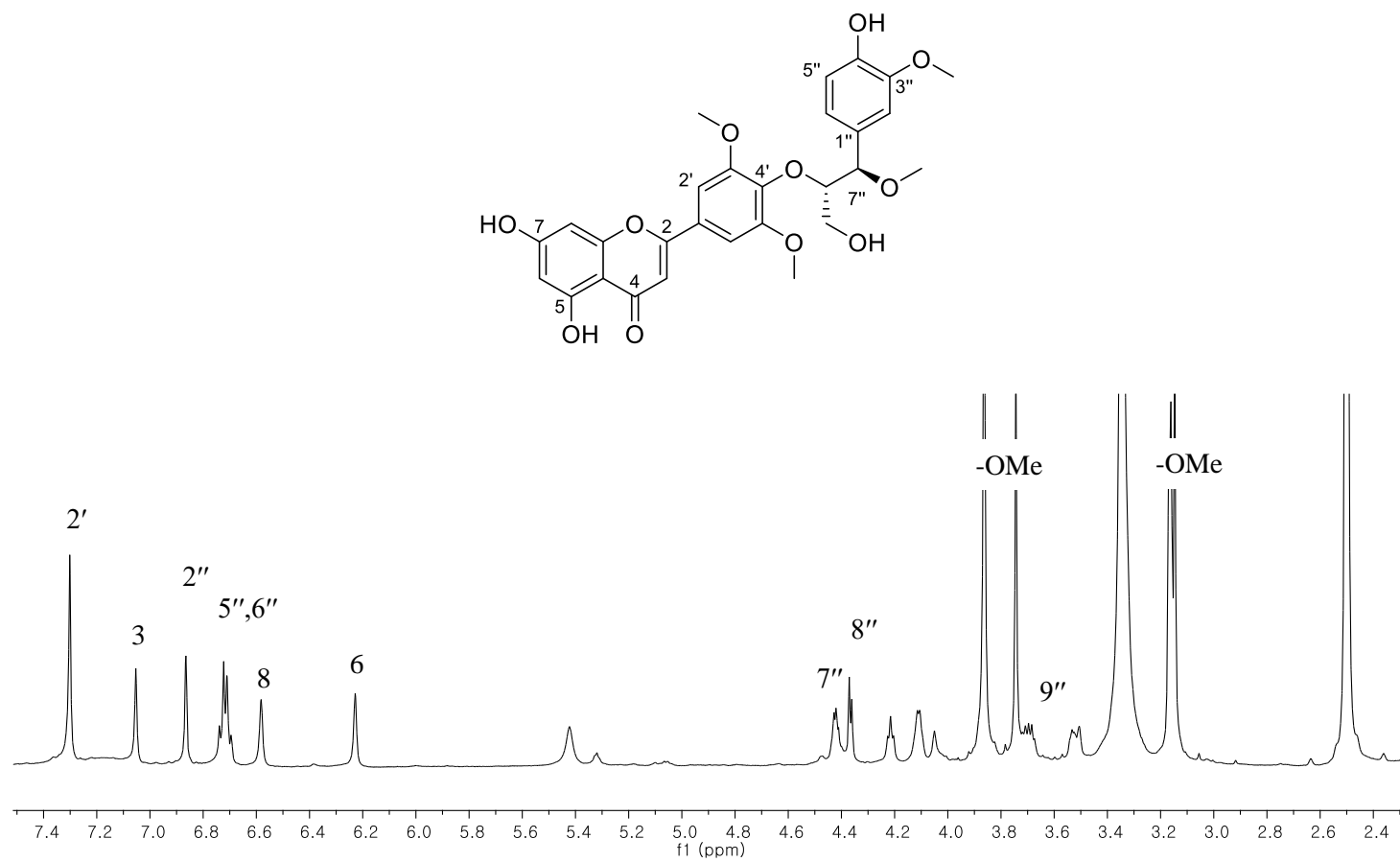


Fig. 81. ^1H -NMR spectrum of compound **22**

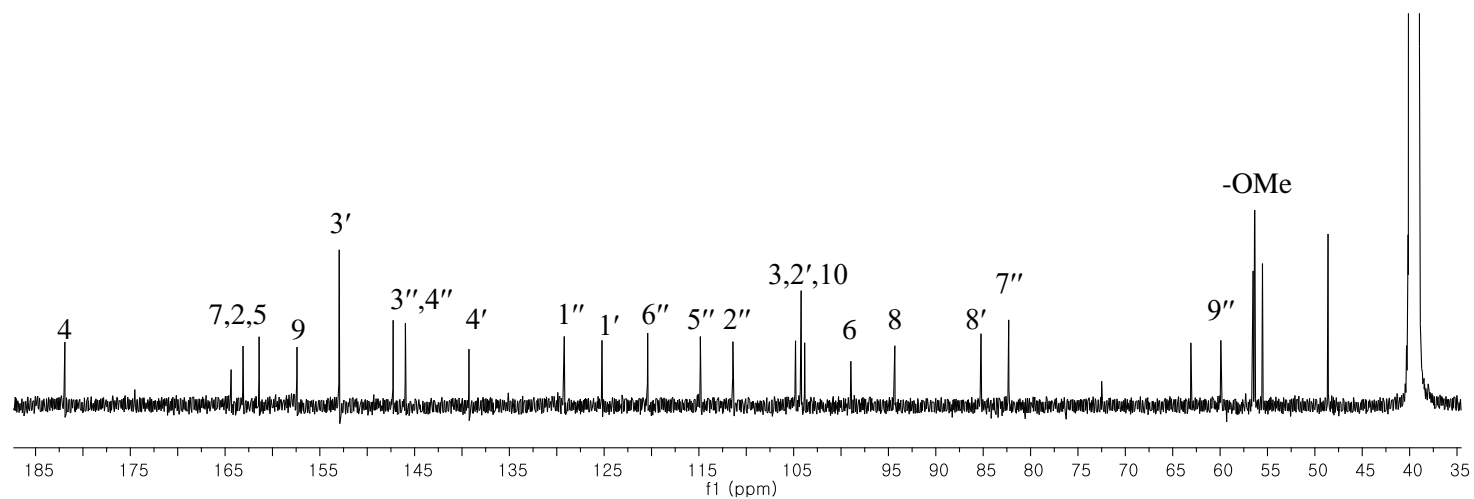
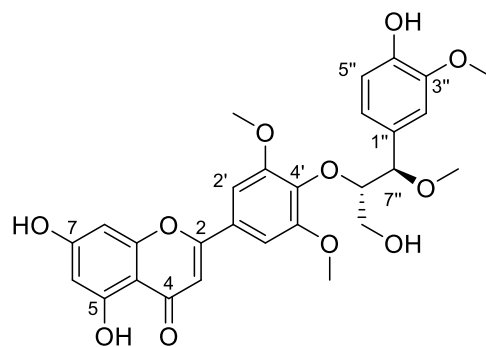


Fig. 82. ^{13}C -NMR spectrum of compound 22

1.19 화합물 **24**의 구조

화합물 **24**는 황색무정형 화합물로서 HRESIMS 값 m/z 459.1281 $[M + Na]^+$ (calcd. for $C_{21}H_{24}O_{10}Na$, 459.1267)에 의해 분자식이 $C_{21}H_{24}O_{10}$ 이다. 1H NMR 과 HSQC spectra에서 두 개의 *ortho*-coupling signal [δ_H 7.07 (1H, d, $J = 8.4$ Hz), 6.68 (1H, d, $J = 8.4$ Hz)], 두 개의 *meta*-coupling signal [δ_H 6.18 (1H, d, $J = 2.2$ Hz), 5.95 (1H, d, $J = 2.2$ Hz)], anomeric proton [5.04 (1H, d, $J = 7.2$ Hz)], 두 개의 methylene 피크 [δ_H 2.88 (2H, t, $J = 7.4$ Hz), 3.44 (2H, m)]를 확인할 수 있다. ^{13}C NMR spectrum에서 하나의 ketone (δ_C 206.6), 두 개의 aromatic 링 (δ_C 167.7, 166.0, 162.4, 156.5, 134.0, 130.5 \times 2, 116.2 \times 2, 106.8, 95.5, 98.4), anomeric carbon (δ_C 102.1), 다섯 개의 oxygenated 피크 (δ_C 74.8, 78.6, 71.1, 78.5, 62.5) 그리고 두 개의 methylene 피크 (δ_C 47.1, 30.9)을 보이며, chalcone 골격의 화합물임을 추정할 수 있다. 문헌치와의 비교로 화합물 **24**는 phloridzin 이다 (Turner et al., 2005).

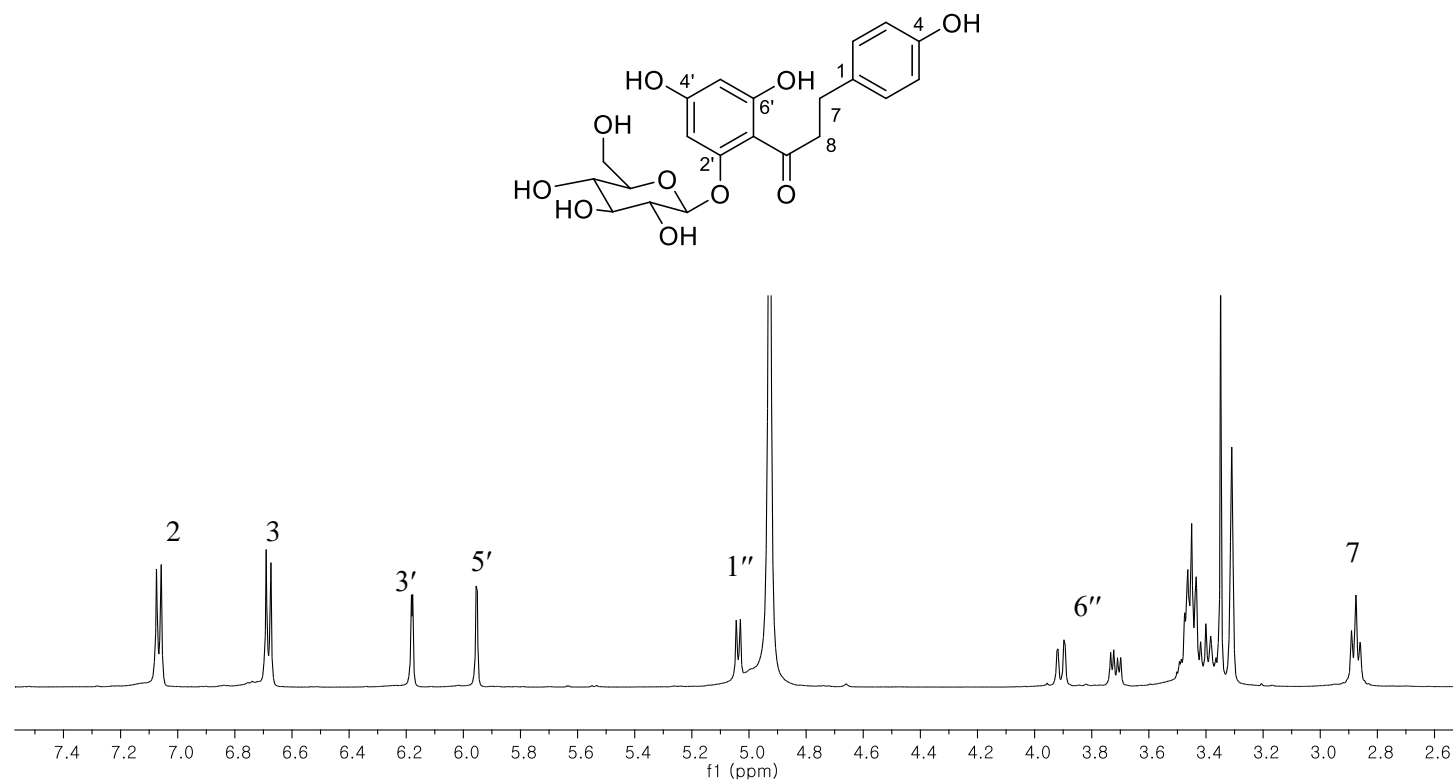


Fig. 83. ^1H -NMR spectrum of compound **24**

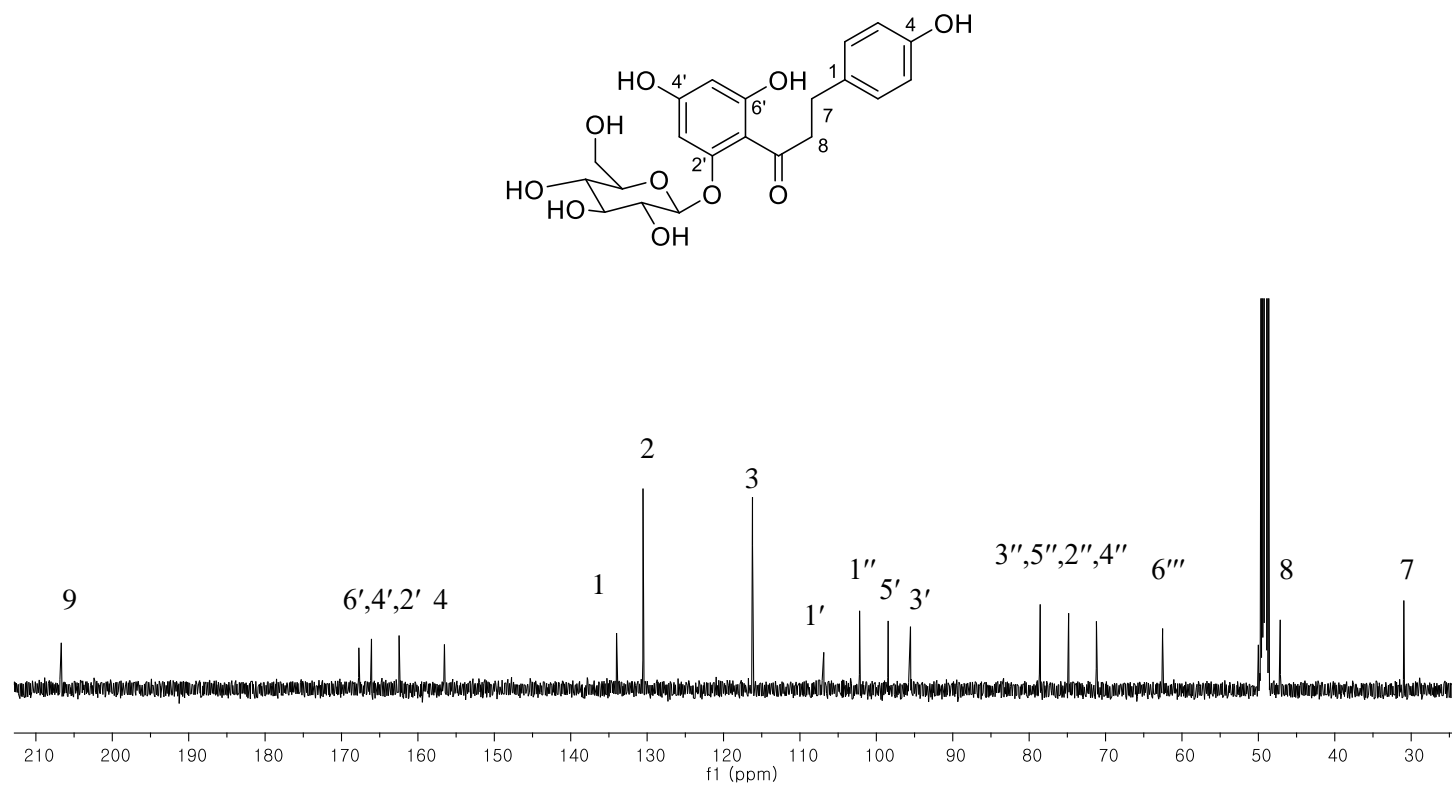


Fig. 84. ^{13}C -NMR spectrum of compound **24**

1.20 화합물 **25**, **26**, **27**, **28**의 구조

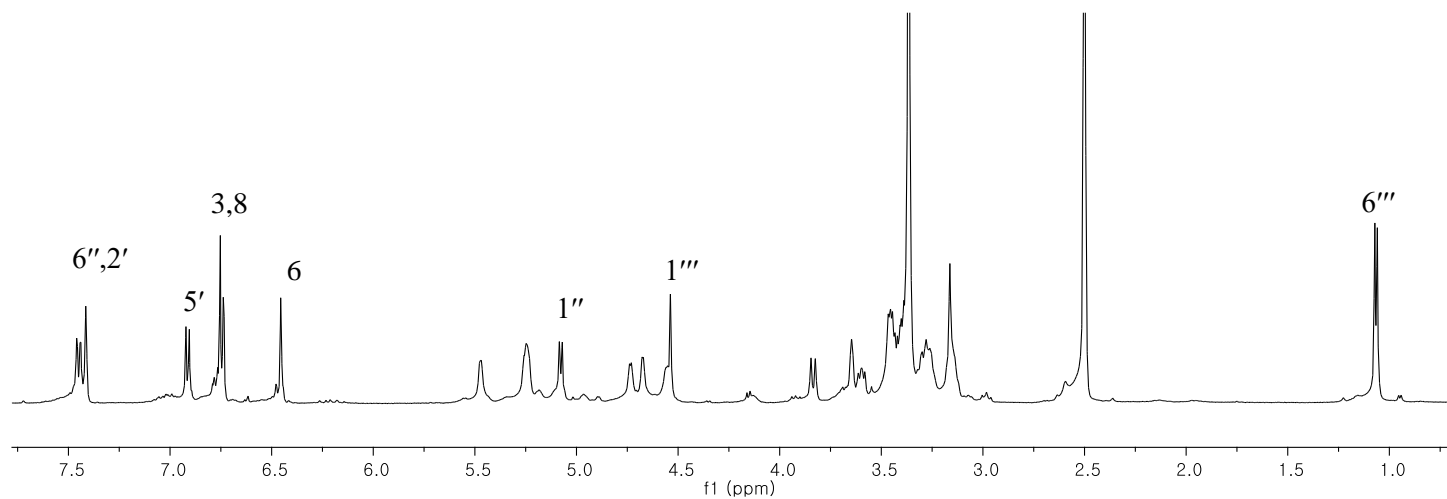
화합물 **25**는 황색무정형 분말형태이며 HRESIMS 값 m/z 595.1682 $[M+H]^+$ (calcd. for $C_{27}H_{30}O_{15}Na$, 595.1663)으로 분자식 $C_{27}H_{30}O_{15}$ 을 구하였다. 1H NMR spectrum에서 1,3,4-치환체 signal [δ_H 7.45 (1H, dd, $J = 8.4, 2.0$ Hz), 7.41 (1H, d, $J = 2.0$ Hz), 6.91 (1H, d, $J = 8.4$ Hz)], *meta*-coupling 피크 [δ_H 6.45 (1H, d, $J = 2.0$ Hz), 6.74 (1H, d, $J = 2.0$ Hz)] 그리고 singlet 피크 [δ_H 6.75 (1H, s)]를 확인할 수 있었다. 이것은 flavone 골격의 5, 7, 3', 4'위치가 치환되어 있음을 말하며, 두 개의 anomeric signal [δ_C/δ_H 99.8/5.08 (1H, d, $J = 7.3$ Hz), 99.5/4.54 (1H, s)]과 methyl기 [δ_C/δ_H 17.8/1.07 (3H, d, $J = 6.2$ Hz)]를 통해 rutinose의 존재 또한 알 수 있다. 이를 토대로 문헌과 비교를 하여 화합물 **25**를 luteolin-7-*O*-rutinoside로 동정하였다 (Siciliano et al., 2004).

화합물 **26**은 황색분말의 성상으로 분자식이 $C_{27}H_{36}O_{16}$ 이다 [m/z 661.1627 $[M+H]^+$ (calcd. for $C_{27}H_{31}O_{16}$, 661.1612)]. 1H NMR spectrum에서 보이는 δ_H 7.93 (1H, d, $J = 2.0$ Hz), 7.58 (1H, dd, $J = 8.5, 2.0$ Hz), 6.92 (1H, d, $J = 8.5$ Hz), 6.45 (1H, d, $J = 2.0$ Hz), 6.20 (1H, d, $J = 2.0$ Hz) signal을 통해 이 구조는 flavonol 골격에 3, 5, 7, 3', 4' 위치가 치환되어 있음을 알 수 있다. 두 개의 anomeric signal [δ_C/δ_H 98.5/5.68 (1H, d, $J = 7.3$ Hz), 102.3/4.79 (1H, d, $J = 4.7$ Hz)]과 아홉 개의 carbon 값 (δ_C 79.6, 77.4, 77.1, 72.0, 70.6, 69.6, 65.8, 62.4, 60.0)을 통하여 α -D-xylopyranoside 와 β -D-glucopyranoside의 존재를 알 수 있다. HMBC (δ_H 3.85/ δ_C 146.9)를 통해 methoxyl기가 C-3'위치에 있으며,

이상의 데이터와 문헌치와의 비교로 화합물 **26**을 isorhamnetin 3-*O*- α -D-xylopyranosyl-(1 \rightarrow 2)- β -D-glucopyranoside로 동정하였다 (Monika et al., 2011).

황색분말 화합물 **27**의 분자식은 분자량 [m/z 611.1627 [$M + H$]⁺ (calcd. for C₂₇H₃₁O₁₆, 661.1612)]에 의해 C₂₇H₃₀O₁₆로 동정하였다. ¹H NMR spectrum에서 δ_H 7.44 (1H, m), 7.43 (1H, s), 6.93 (1H, d, J = 8.8 Hz), 6.80 (1H, d, J = 2.1 Hz), 6.61 (1H, s), 6.60 (1H, d, J = 2.1 Hz)으로 flavone 골격에 5, 7, 3', 4'가 치환되어 있는 것을 추정할 수 있다. 두 개의 anomeric signal [δ_C/δ_H 101.7/5.08 (1H, d, J = 7.1 Hz), 105.1/4.37 (1H, d, J = 7.6 Hz)]과 열 개의 carbon 피크 (δ_C 78.2, 78.1, 77.8, 77.3, 75.2, 74.8, 71.7, 71.4, 70.3, 62.9)를 통해 두 개의 β -D-glucopyranoside의 존재를 알 수 있다. 이전의 보고된 문헌과의 비교를 통해 화합물 **27**번을 luteolin-7-*O*- β -D-glucopyranosyl-(1''' \rightarrow 6'')-*O*- β -D-glucopyranoside로 동정하였다 (Amani et al., 2016).

화합물 **28**은 황색분말 성상에 분자식 C₂₁H₂₀O₁₁을 갖는다 [m/z 397.1492 [$M+Na$]⁺ (calcd. for C₁₇H₂₆O₉Na, 397.1475)]. 화합물 **27**번과 거의 유사한 NMR spectra 패턴을 가지며, ¹H NMR spectrum에서 δ_H 7.42 (1H, m), 7.42 (1H, s), 6.91 (1H, d, J = 8.3 Hz), 6.81 (1H, d, J = 1.9 Hz), 6.62 (1H, s), 6.51 (1H, d, J = 1.9 Hz)으로 luteolin의 구조를 동정할 수 있다. 그리고 하나의 β -D-glucopyranoside로 추정되는 하나의 anomeric signal [δ_C/δ_H 101.7/5.07 (1H, d, J = 5.4 Hz)]과 다섯 개의 carbon signal (δ_C 78.5, 77.9, 74.8, 71.3, 62.5)을 발견할 수 있다. 문헌치와의 비교를 통해 화합물 **28**의 구조가 luteolin-7-*O*- β -D-glucopyranoside임을 확인하였다 (Amani et al., 2016).



171

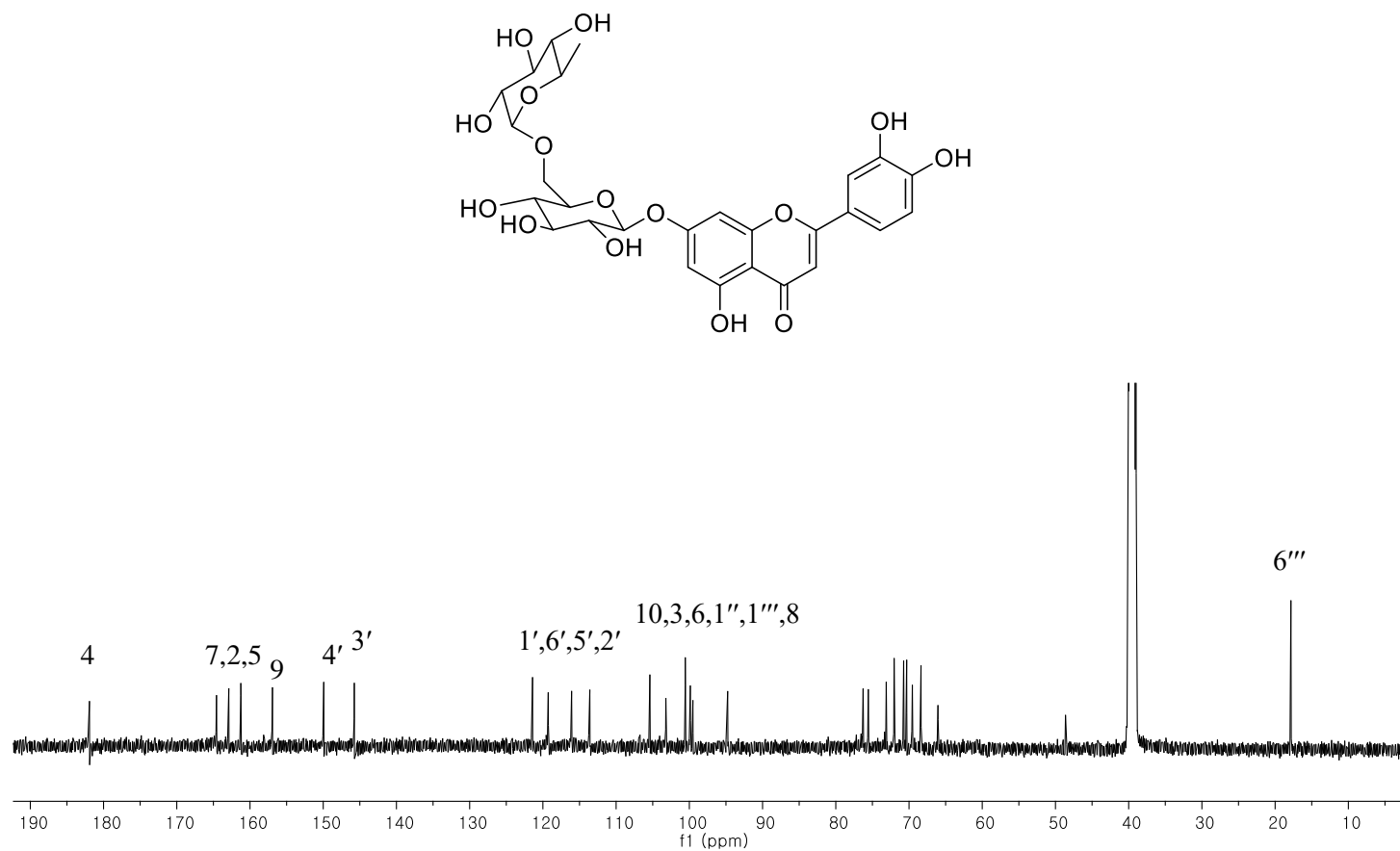


Fig. 86. ^{13}C -NMR spectrum of compound **25**

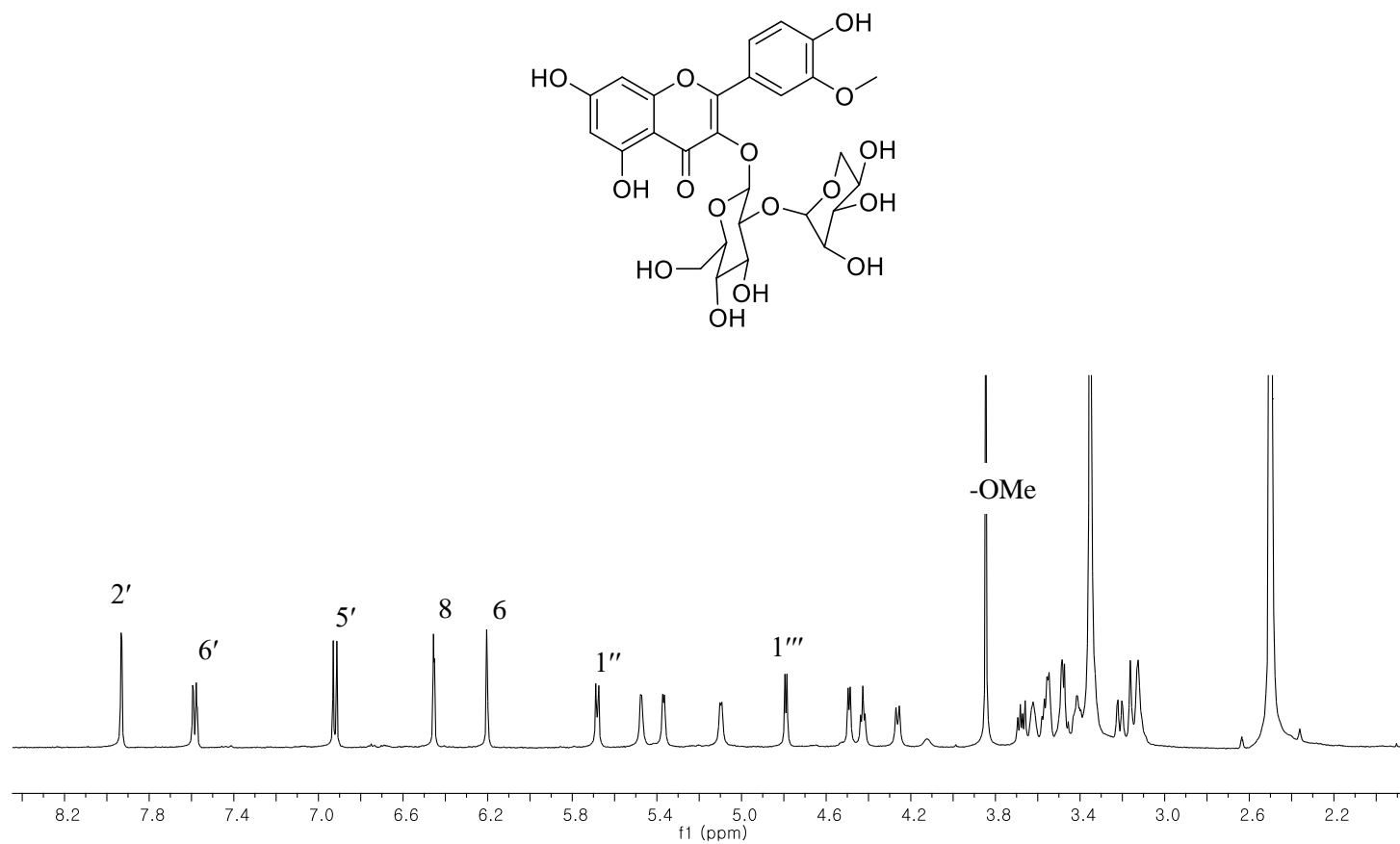


Fig. 87. ^1H -NMR spectrum of compound **26**

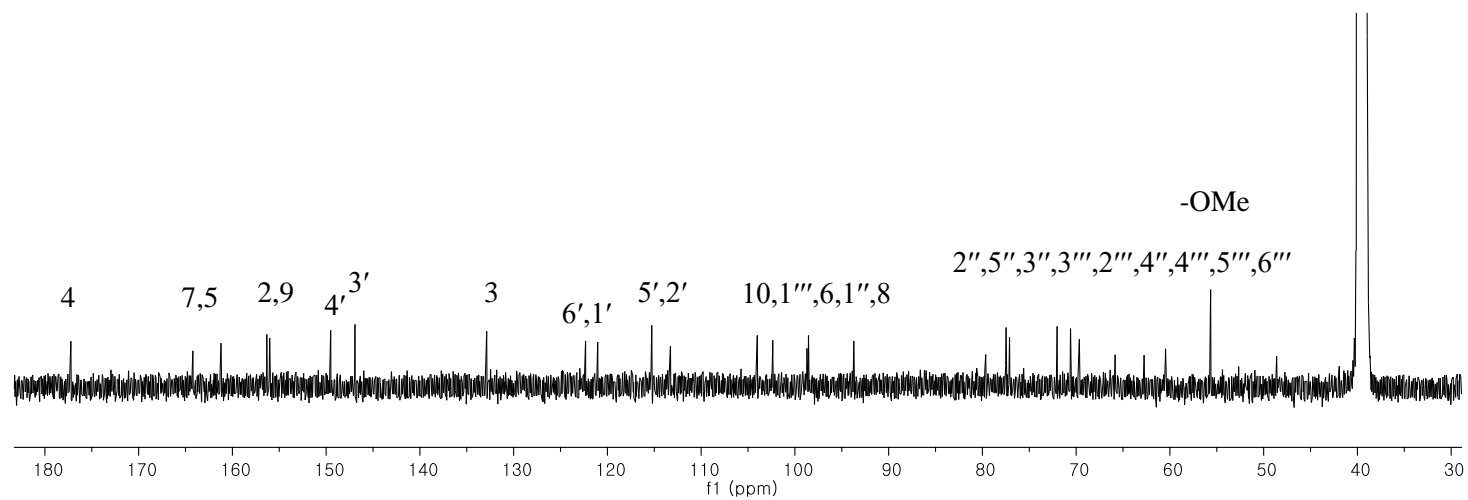
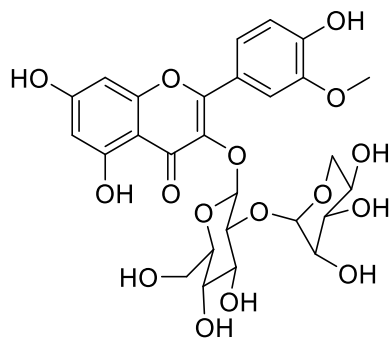


Fig. 88. ^{13}C -NMR spectrum of compound **26**

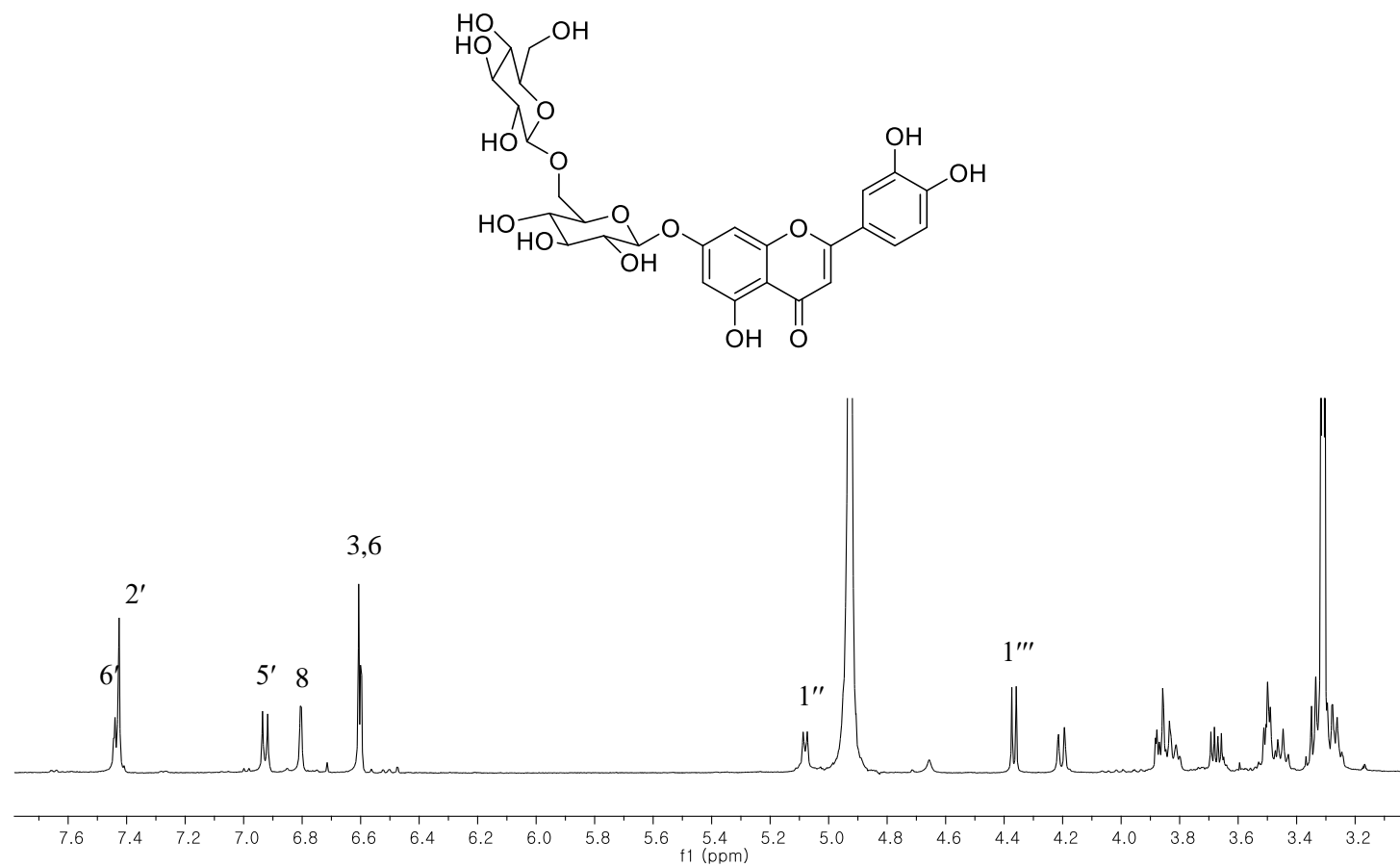


Fig. 89. ^1H -NMR spectrum of compound 27

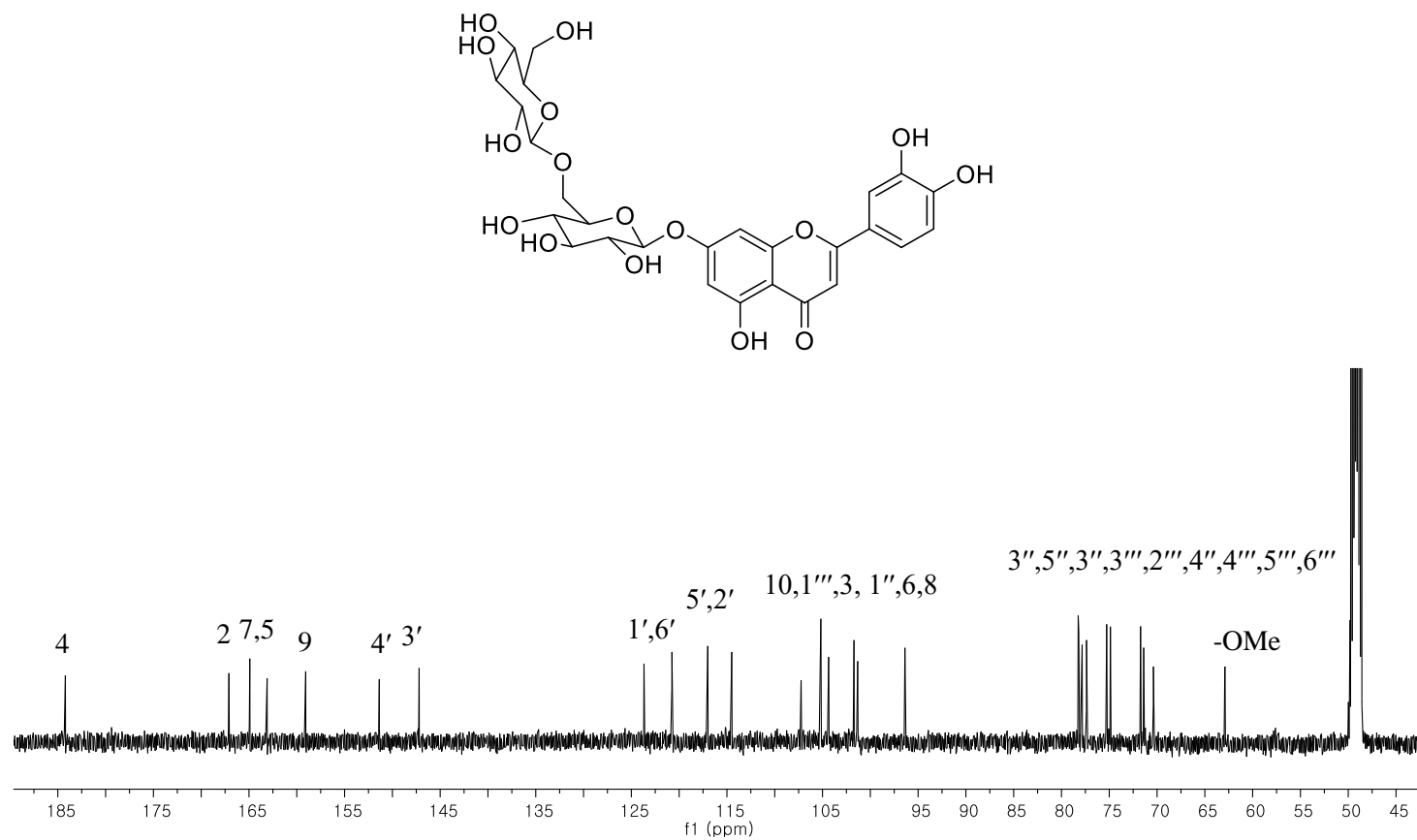


Fig. 90. ^{13}C -NMR spectrum of compound **27**

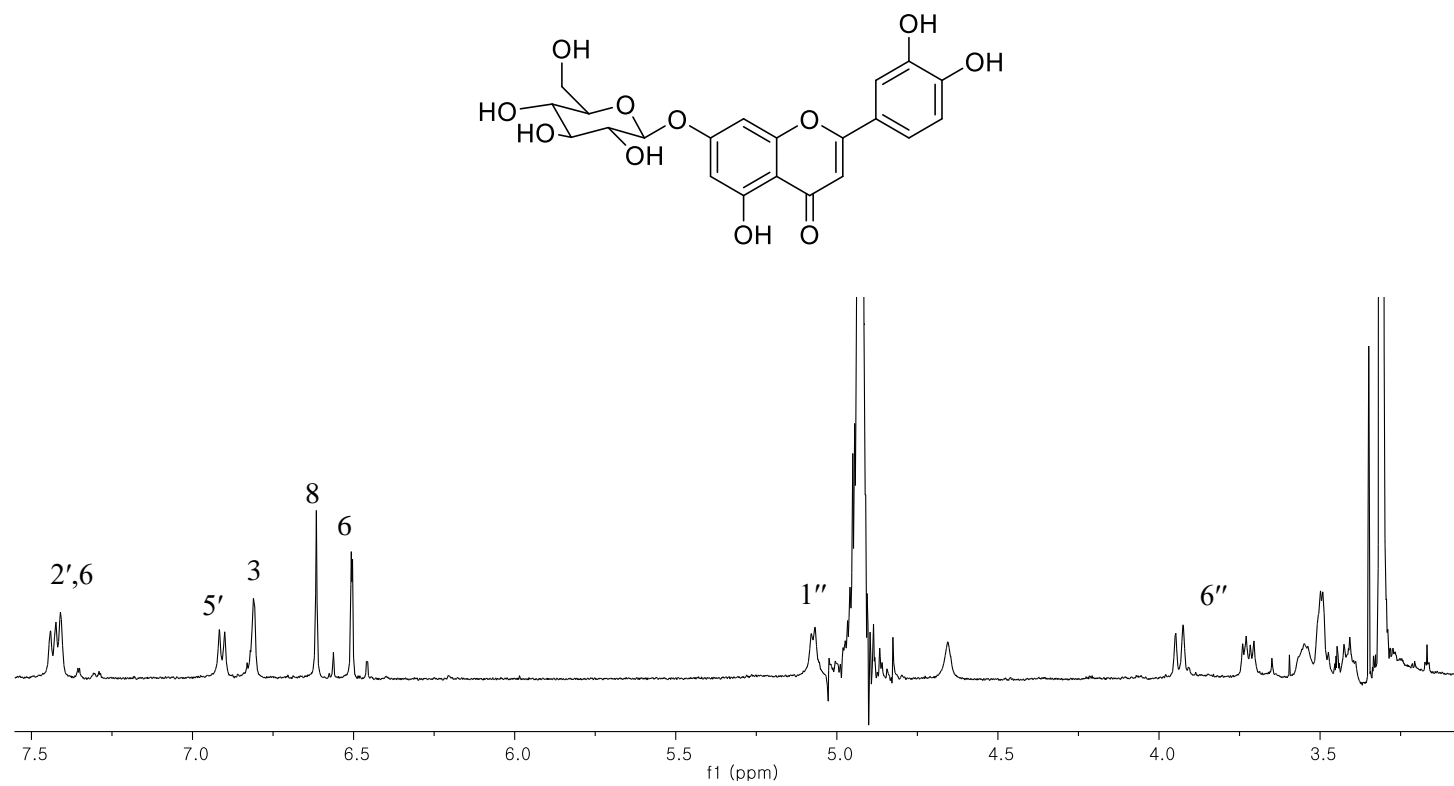


Fig. 91. ^1H -NMR spectrum of compound **28**

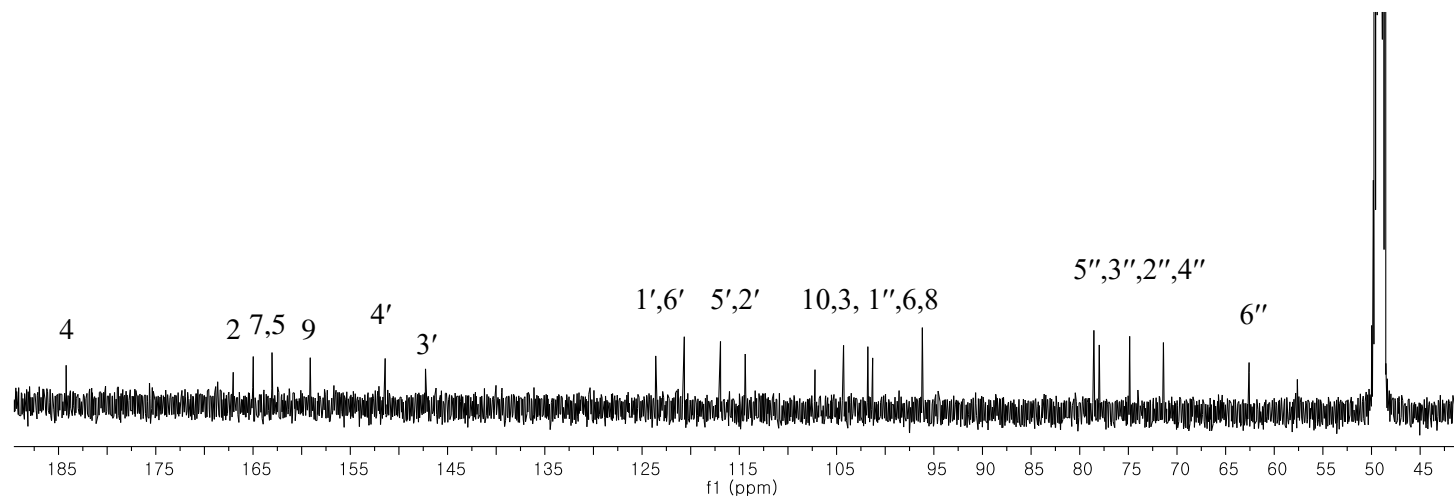
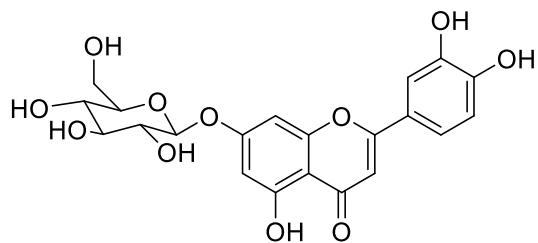


Fig. 92. ^{13}C -NMR spectrum of compound **28**

1.21 화합물 **29**, **30**의 구조

화합물 **29**은 갈색분말형태이며 분자식이 $C_{21}H_{30}O_9$ 이다 [m/z 449.1767 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{21}H_{30}O_9Na$, 449.1788)]. 1H , ^{13}C NMR spectra에서 두 개의 carbonyl기 (δ_C 181.7, 168.0), 두 쌍의 aromatic 피크 [δ_C/δ_H 150.0/5.82 (1H, d, $J = 9.9$ Hz), 143.3, 132.0, 127.5/4.88 (1H, m)], anomeric signal [δ_C/δ_H 95.5/5.54 (1H, d, $J = 8.0$ Hz)], 여섯 개의 oxygenated 피크 [δ_C/δ_H 83.4/4.73 (1H, d, $J = 11.9$ Hz), 79.0/3.38 (1H, m), 78.5/ 3.43 (1H, m), 74.2/3.37 (1H, m), 71.2/3.37 (1H, m), 62.5/3.83 (1H, d, $J = 12.6$ Hz), 3.69 (1H, dd, $J = 12.0, 4.5$ Hz)], 여섯 개의 methine group [δ_C/δ_H 55.7/1.77 (1H, d, $J = 11.9$ Hz), 43.6/2.36 (1H, m), 40.2/2.34 (1H, m), 2.27 (1H, m), 37.5/2.82 (1H, d, $J = 11.7$ Hz), 2.03 (1H, m), 31.4/2.03 (1H, m), 1.93 (1H, dd, $J = 12.9, 6.4$ Hz), 27.7/3.39 (1H, m), 2.28 (1H, m)] 그리고 두 개의 methyl기 [δ_C/δ_H 17.3/1.63 (3H, s), 13.4/1.21 (3H, d, $J = 7.0$ Hz)] 이 보이므로, 15 + 6개의 carbon피크를 토대로 sesquiterpene 구조의 하나의 glucose가 연결되어 있는 것을 추정할 수 있다. 문헌치와 비교를 통해 화합물 **29**를 11 β ,13-dihydrotaraxinic acid 1'-*O*- β -D-glucopyranoside로 동정하였다 (Michaska et al., 2010).

갈색 분말 화합물 **30**은 HRMS [m/z 447.1641 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{21}H_{28}O_9Na$, 447.1631)]를 통해 분자식 $C_{21}H_{28}O_9$ 을 구할 수 있다. NMR spectra가 화합물 **29**와 거의 유사하며, 1D NMR spectra에서 두 개의 carbonyl기 (δ_C 172.9, 168.0), 세 쌍의 aromatic 피크 [δ_C/δ_H 149.8/5.84 (1H, dd, $J = 12.8, 3.7$ Hz), 144.7, 142.1, 132.9, 127.4/4.98 (1H, dd, $J = 10.0, 1.1$ Hz), 120.5/6.18 (1H, d, $J = 3.6$ Hz), 5.64 (1H, d, $J = 3.6$ Hz)], anomeric signal [δ_C/δ_H 101.9/4.33 (1H, d, $J = 7.8$ Hz)], 여섯 개의 oxygenated 피크 [δ_C/δ_H 83.4/4.74 (1H, dd, $J = 10.1, 8.7$ Hz), 79.0/3.38 (1H, m), 78.5/ 3.43 (1H, m), 74.1/3.37 (1H, m), 71.3/3.37 (1H, m), 62.5/3.83 (1H, dd, $J = 12.2, 1.8$ Hz), 3.69 (1H, dd, $J = 12.0, 4.5$ Hz)], 다섯 개의 methine group [δ_C/δ_H 55.7/2.72 (1H, m), 40.2/2.37 (1H, m), 2.30 (1H, m), 37.5/2.89 (1H, dd, $J = 12.5, 5.8$ Hz), 2.13 (1H, m), 31.4/2.23 (1H, m), 2.09 (1H, m), 27.8/3.39 (1H, m), 2.32 (1H, m)] 그리고 하나의 methyl기 [δ_C/δ_H 17.4/1.64 (3H, d, $J = 1.2$ Hz)]가 보이며, 화합물 **29**와의 차이점은 C-11, 13이 더블본드 형태이다. 문헌치와의 비교를 통해 화합물 **30**을 taraxinic acid 1'-O- β -D-glucopyranoside 로 동정하였다 (Hansel et al., 1980).

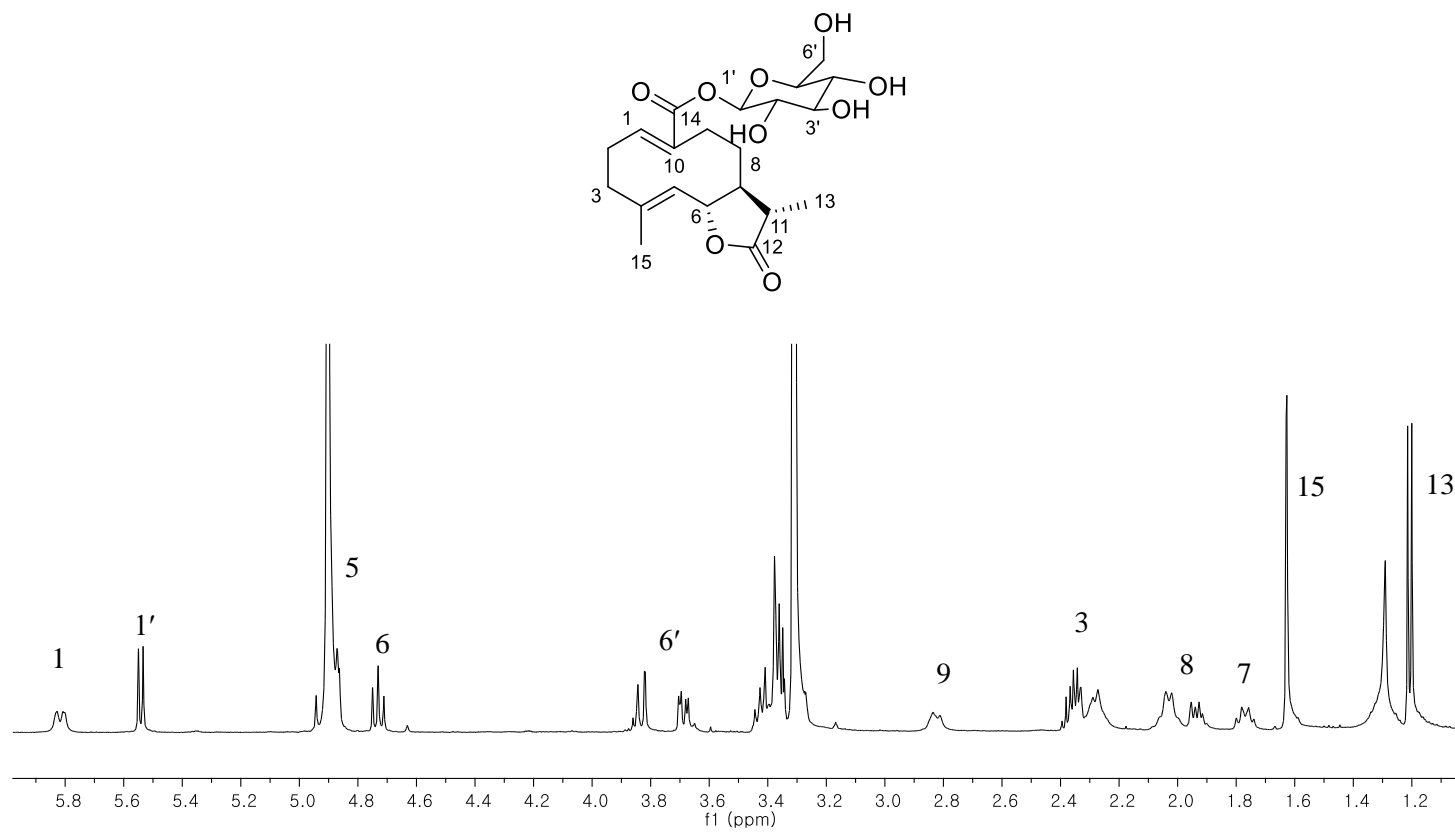


Fig. 93. ^1H -NMR spectrum of compound **29**

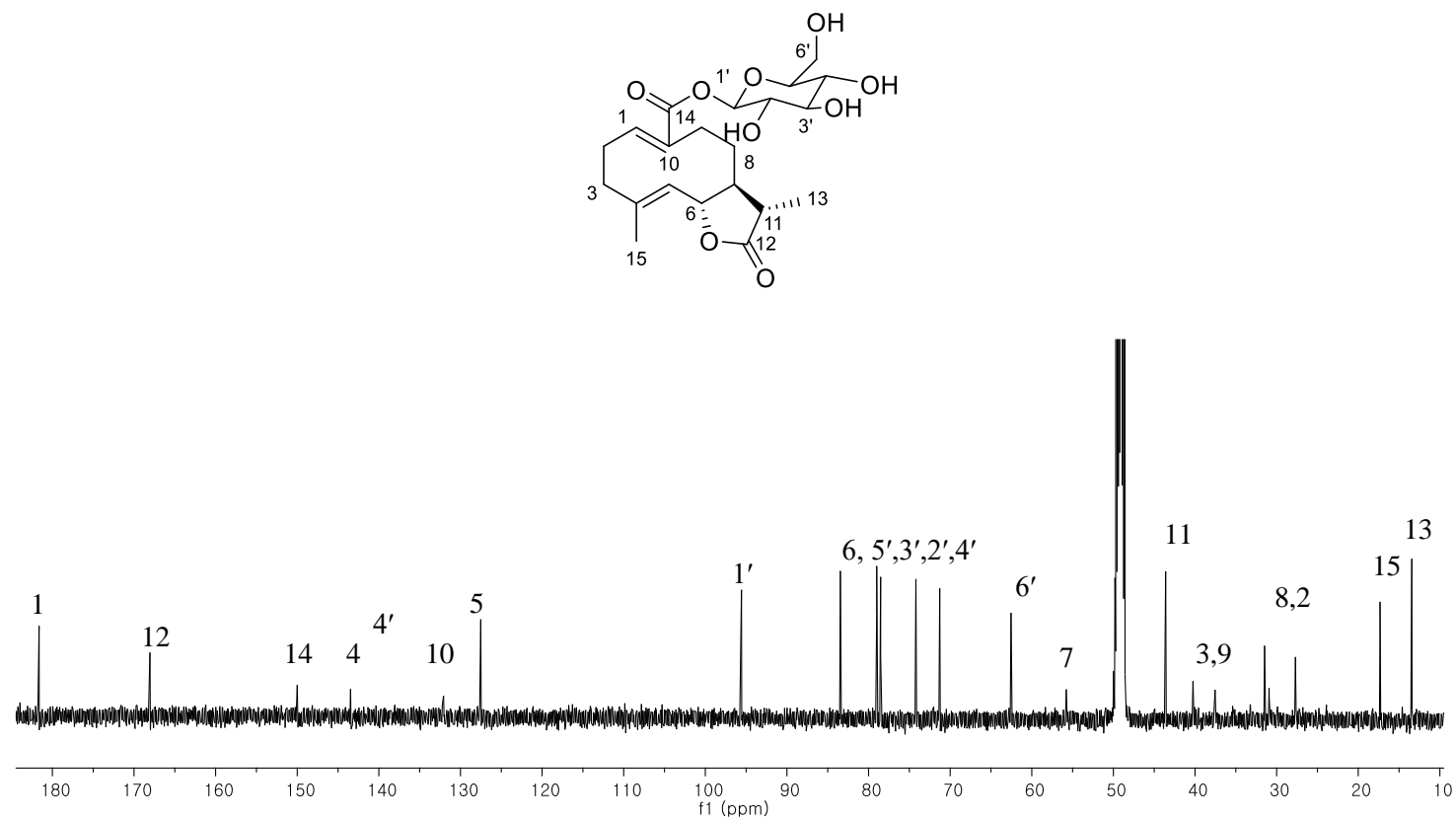


Fig. 94. ^{13}C -NMR spectrum of compound **29**

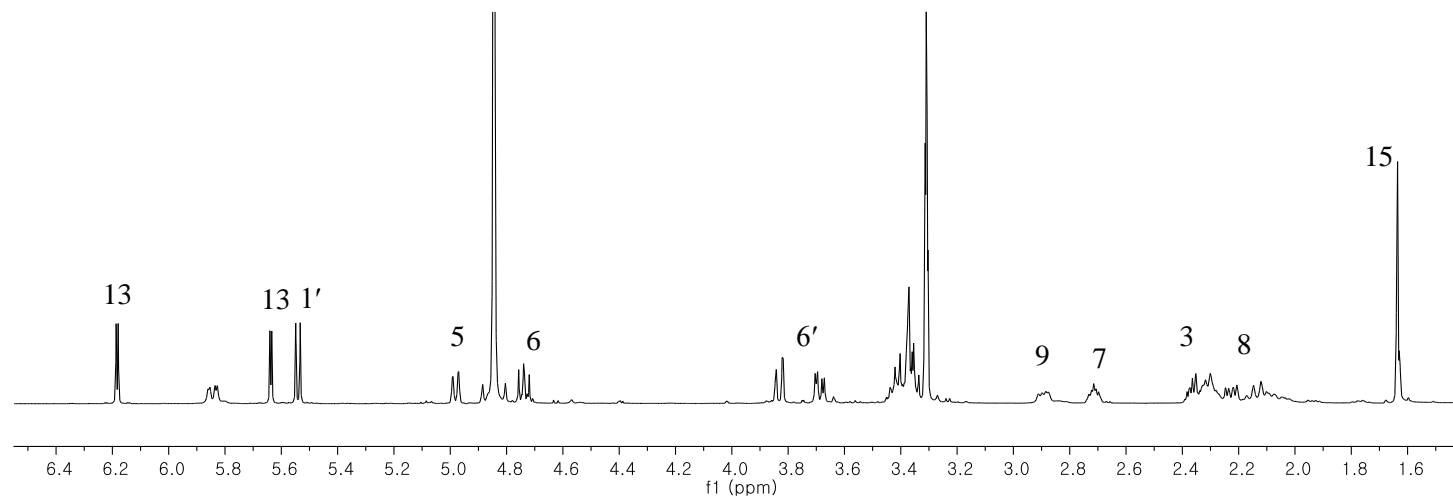
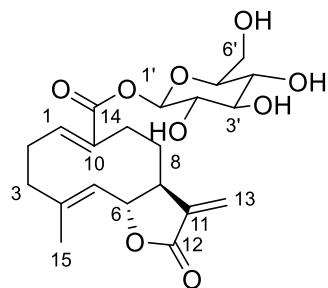


Fig. 95. ^1H -NMR spectrum of compound **30**

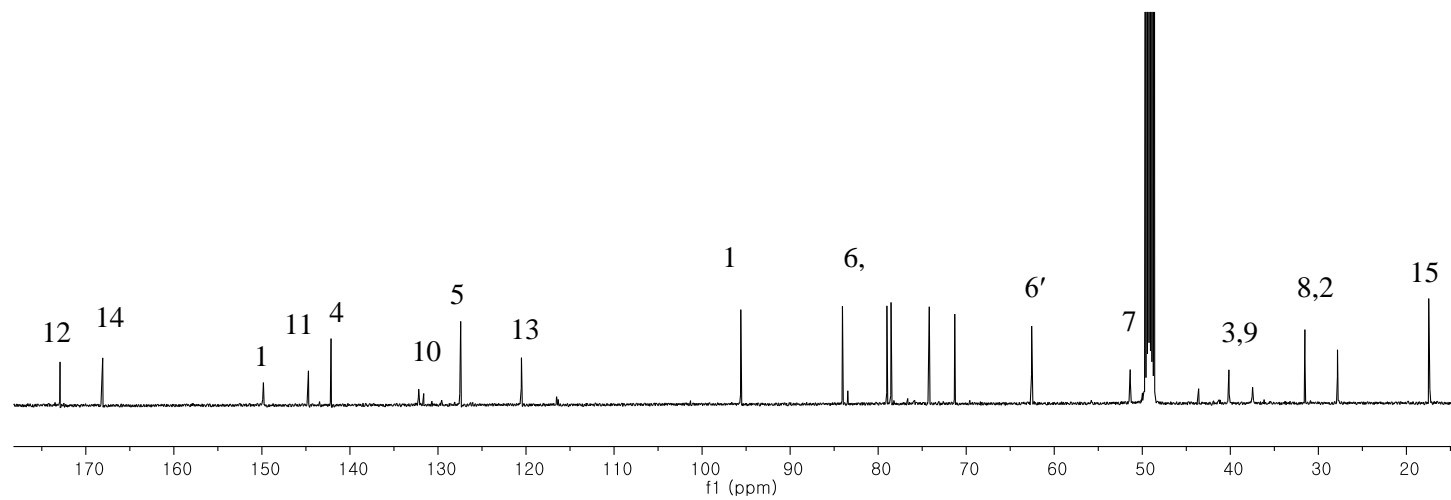
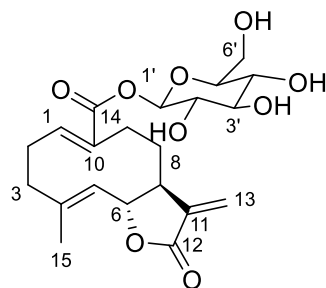


Fig. 96. ^{13}C -NMR spectrum of compound **30**

1.22 화합물 **31**의 구조

화합물 **31**는 갈색 무정형 분말로 HRESIMS m/z 451.1962 $[M + Na]^+$ (calcd. for $C_{21}H_{32}O_9Na$, 451.1944)를 통해 분자식 $C_{21}H_{32}O_9$ 을 얻었다. 1H NMR spectrum에서 두 개의 aromatic proton [δ_H 5.99 (1H, d, $J = 3.2$ Hz), 5.48 (1H, d, $J = 3.2$ Hz)], anomeric proton [δ_H 4.33 (1H, d, $J = 7.8$ Hz)], 세 개의 oxygenated 피크 [δ_H 4.16 (1H, t, $J = 11.1$ Hz), 3.77 (1H, m), 3.55 (1H, dd, $J = 11.7, 4.0$ Hz)], 아홉 개의 methine 피크 [δ_H 2.54 (1H, td, $J = 11.3, 3.1$ Hz), 2.33 (1H, dd, $J = 12.4, 5.2$ Hz), 2.06 (1H, m), 2.04 (1H, m), 1.98 (1H, m), 1.77 (1H, q, $J = 12.2$ Hz), 1.63 (1H, dd, $J = 11.5, 4.4$ Hz), 1.55 (1H, dd, $J = 12.7, 2.7$ Hz), 1.33 (1H, m)] 그리고 두 개의 methyl기 [δ_H 1.06 (3H, s), 1.00 (3H, d, $J = 7.5$ Hz)]를 보였다.

^{13}C NMR spectrum에서 carbonyl기 (δ_C 173.0), 두 개의 aromatic carbon (δ_C 142.0, 117.2), anomeric carbon (δ_C 101.9), 아홉 개의 oxygenated carbon (δ_C 84.0, 81.7, 78.3, 78.0, 75.1, 71.9, 71.5, 62.1, 52.2), 다섯 개의 methine carbon (δ_C 49.4, 42.1, 40.5, 35.6, 31.8) 그리고 두 개의 methyl carbon (δ_C 16.4, 9.5)을 보였다. 이상의 결과에서 15 + 6개의 carbon피크를 통해 하나의 sesquiterpene 구조와 glucose의 존재를 추정할 수 있으며, 문헌치와의 비교를 통해 화합물 **31**을 3β -hydroxy-4 α H-3-dihydrosantamarine- β -D-glucopyranoside으로 동정하였다 (Zidorn et al., 1999).

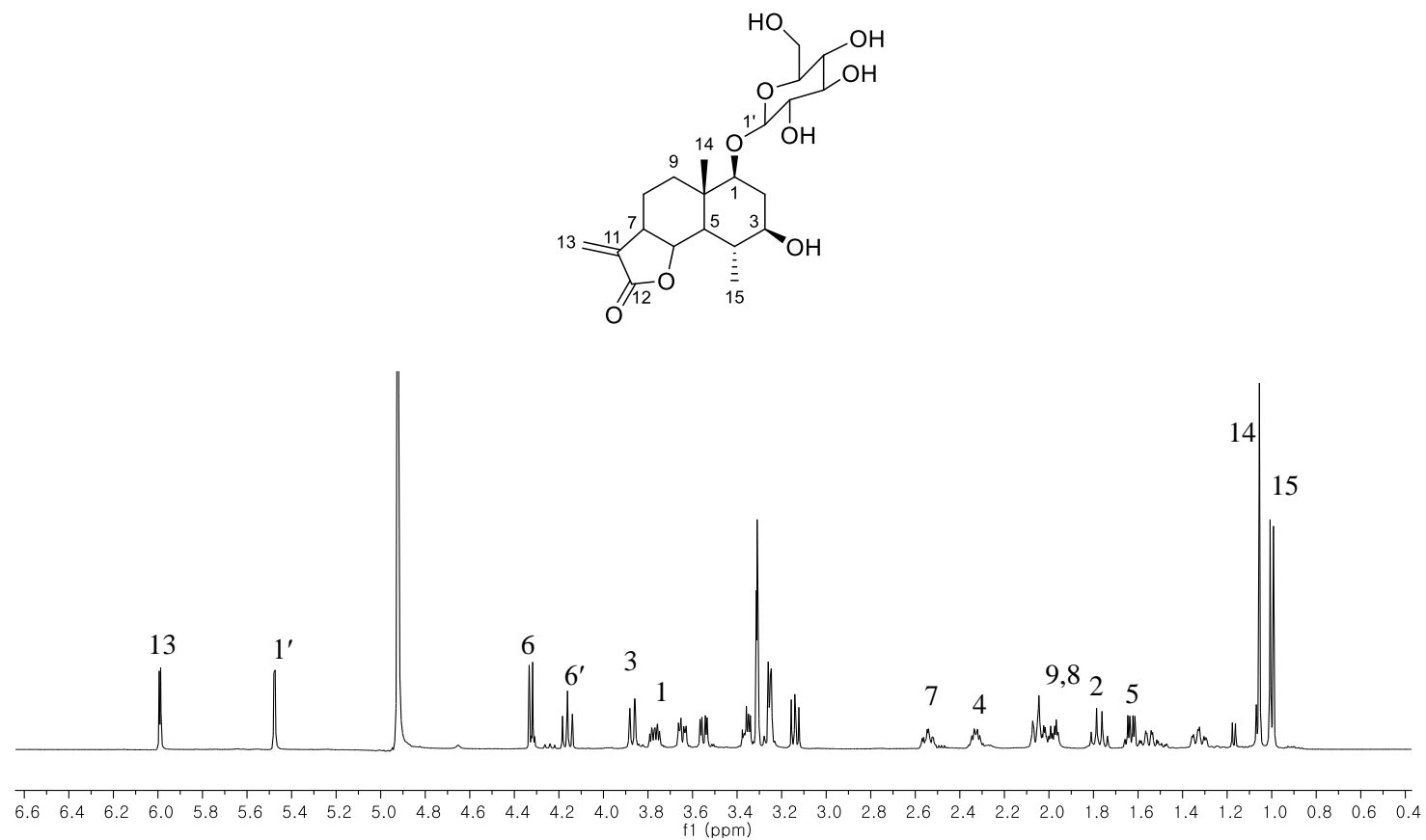


Fig. 97. ^1H -NMR spectrum of compound **31**

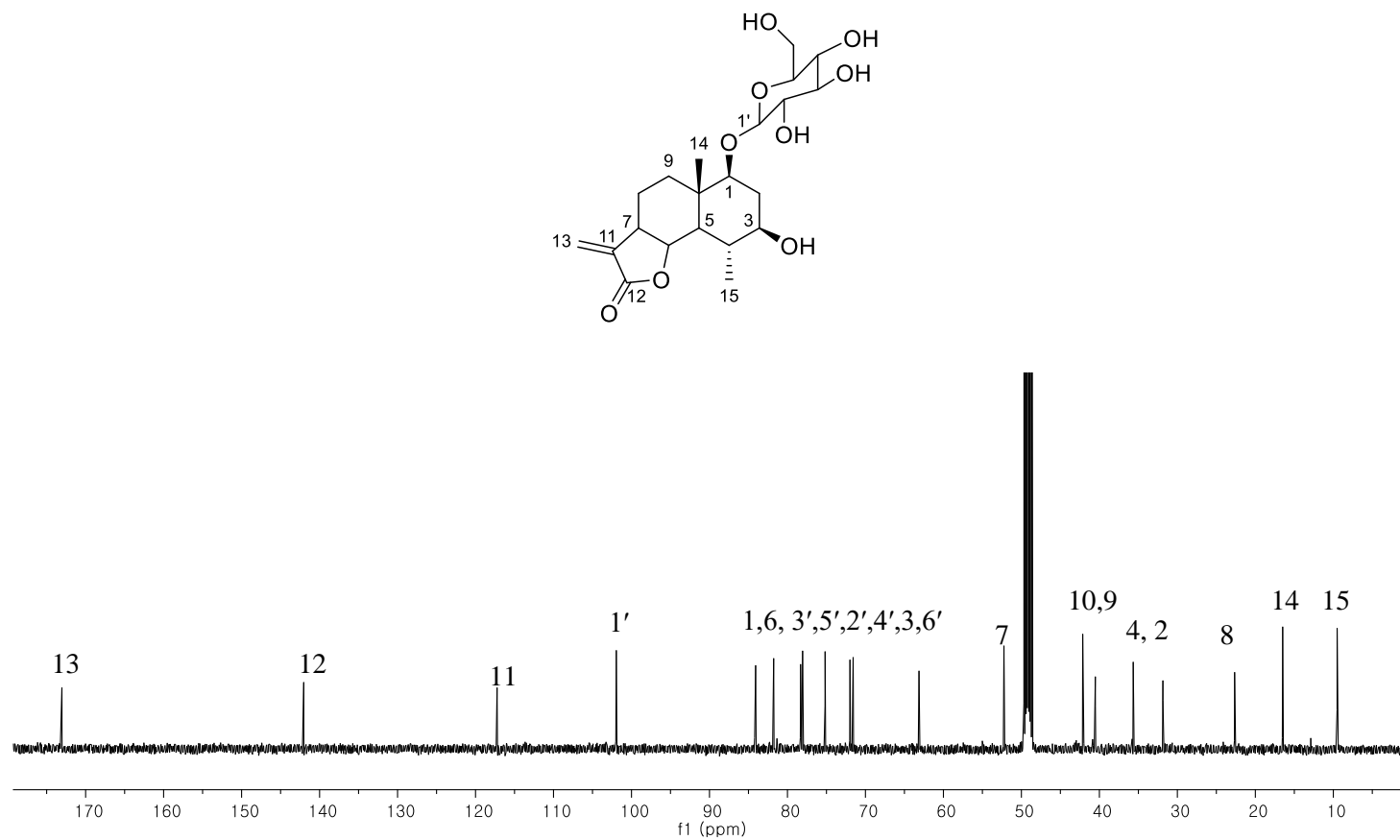


Fig. 98. ^{13}C -NMR spectrum of compound **31**

1.23 화합물 **32**, **33**의 구조

화합물 **32** 는 무색무정형 화합물로서 분자식이 $C_{13}H_{20}O_3$ 이다 [m/z 225.1486 $[M-H]^+$ (calcd. for $C_{13}H_{21}O_3$ 225.1491)]. 1H NMR spectrum 에서 두 개의 aromatic proton [δ_H 7.17 (1H, d, $J = 15.8$ Hz), 6.18 (1H, d, $J = 15.8$ Hz)], 하나의 oxygenated proton [δ_H 3.76 (1H, m)], 네 개의 methine 피크 [δ_H 2.31 (1H, m), 1.62 (1H, dd, $J = 14.3, 9.2$ Hz), 1.58 (1H, ddd, $J = 12.8, 3.2, 1.7$ Hz), 1.26 (1H, dd, $J = 9.8, 2.9$ Hz)] 그리고 네 개의 methyl 기 [δ_H 2.28 (3H, s), 1.19 (3H, s), 1.18 (3H, s), 0.96 (3H, s)]를 확인할 수 있다. ^{13}C NMR spectrum 에서 ketone 기 (δ_C 200.4), 두 개의 aromatic carbon (δ_C 145.5, 133.9), 세 개의 oxygenated carbon (δ_C 71.0, 68.9, 64.5), 세 개의 methylene carbon (δ_C 47.8, 41.4, 29.9), 4 차 탄소 (δ_C 36.2), 네 개의 methyl carbon (δ_C 47.8, 41.4, 29.9)이 보인다. 이상의 데이터와 문헌과 비교하여 화합물 **32** 를 annuionone D 로 동정하였다 (D'Abrosca et al., 2004).

화합물 **33** 은 무색무정형 화합물로 분자식이 $C_{13}H_{20}O_3$ 이다
 $[m/z\ 225.1491\ [M+H]^+]$ (calcd. for $C_{13}H_{21}O_3$, 225.1491)]. 1H NMR spectrum 에서
 한 쌍의 aromatic proton [δ_H 7.28 (1H, d, $J = 16.4$ Hz), 6.15 (1H, d, $J = 16.4$ Hz)],
 두 개의 oxygenated proton [δ_H 3.88 (1H, d, $J = 3.5$ Hz), 3.79 (1H, m)],
 methylene 피크 [δ_H 1.82 (1H, d, $J = 12.6$ Hz), 1.48 (1H, dd, $J = 12.4, 2.4$ Hz)],
 네 개의 methyl 기 [2.32 (3H, s), 1.88 (3H, s), 1.13 (3H, s), 1.09 (3H, s)]가
 보인다. ^{13}C NMR spectrum 에서 ketone 기 (δ_C 197.7), 두 쌍의 aromatic
 carbon (δ_C 142.5, 138.7, 134.3, 133.7), 두 개의 oxygenated carbon (δ_C 71.9,
 66.8), methylene carbon (δ_C 42.4), 4 차 탄소 하나 (δ_C 37.0) 그리고 네 개의
 methyl 기 (δ_C 30.0, 27.6, 27.4, 20.2)를 확인하였다. 이상의 데이터와
 문헌치와 비교하여 화합물 **33** 을 3,4-dihydroxy-5,7-megastigmadien-
 9-one 으로 동정하였다 (Xie et al., 2005).

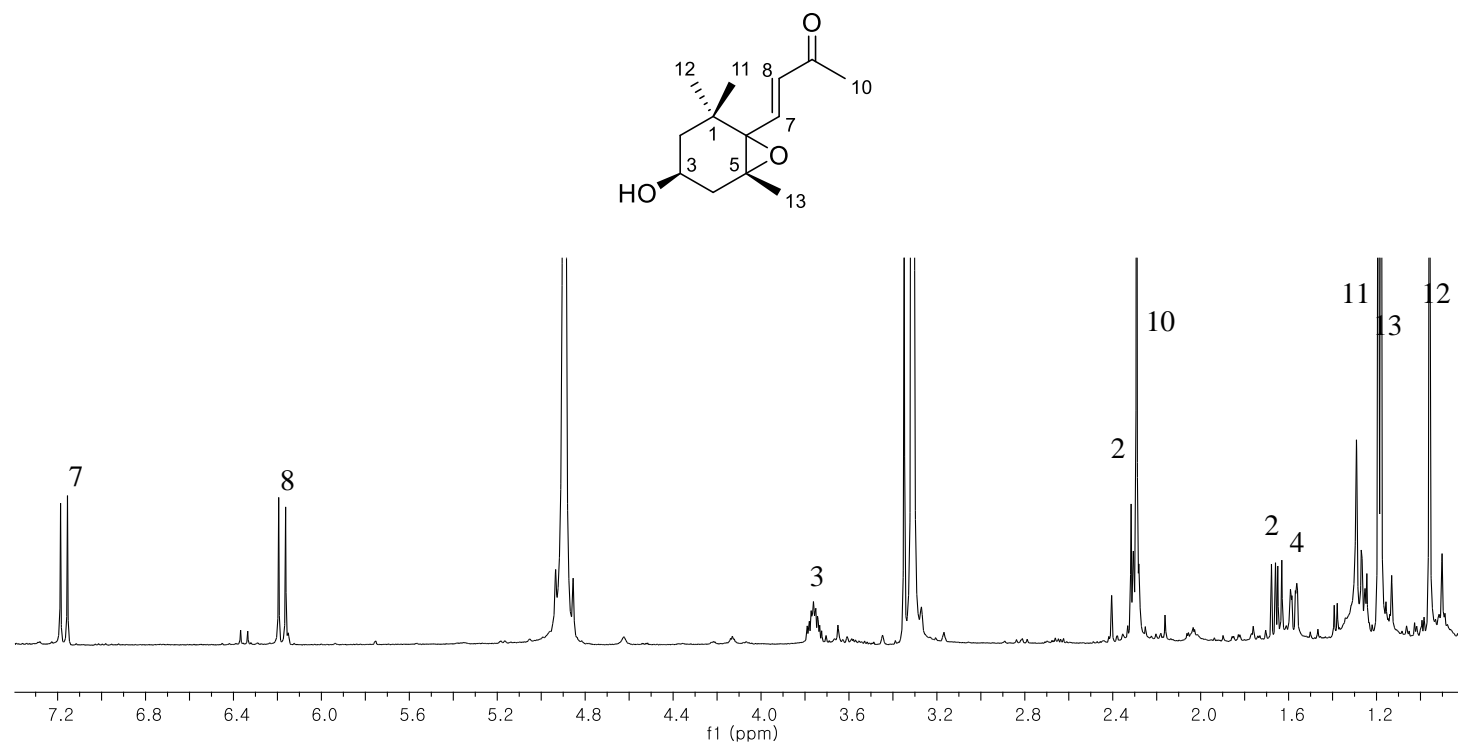


Fig. 99. ^1H -NMR spectrum of compound **32**

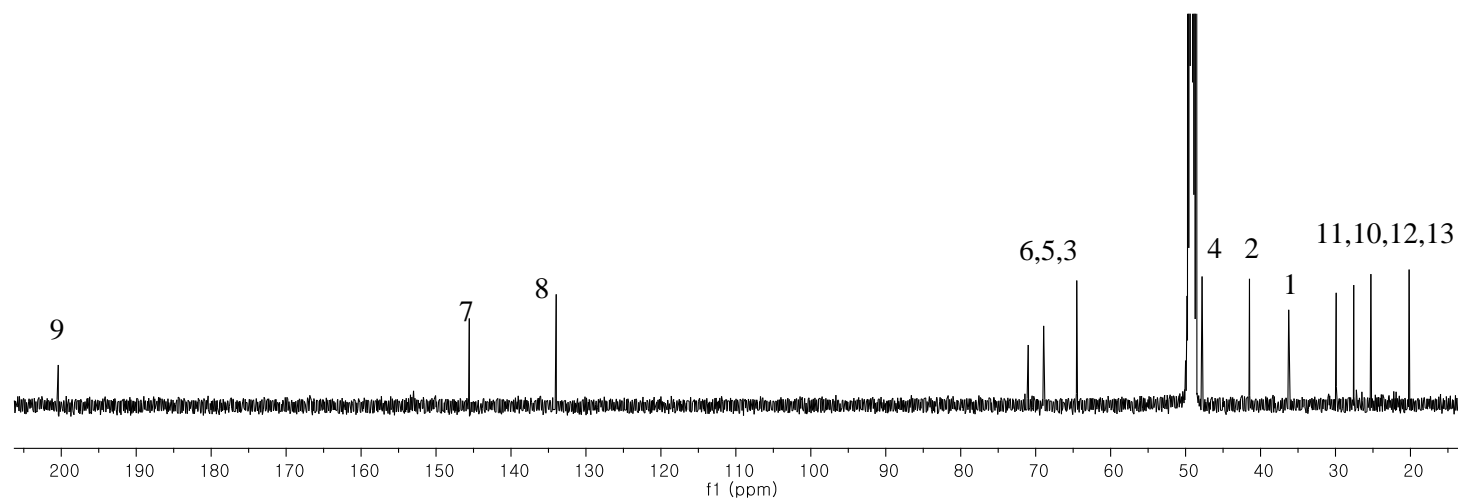
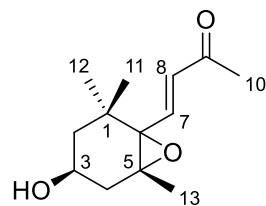


Fig. 100. ^{13}C -NMR spectrum of compound **32**

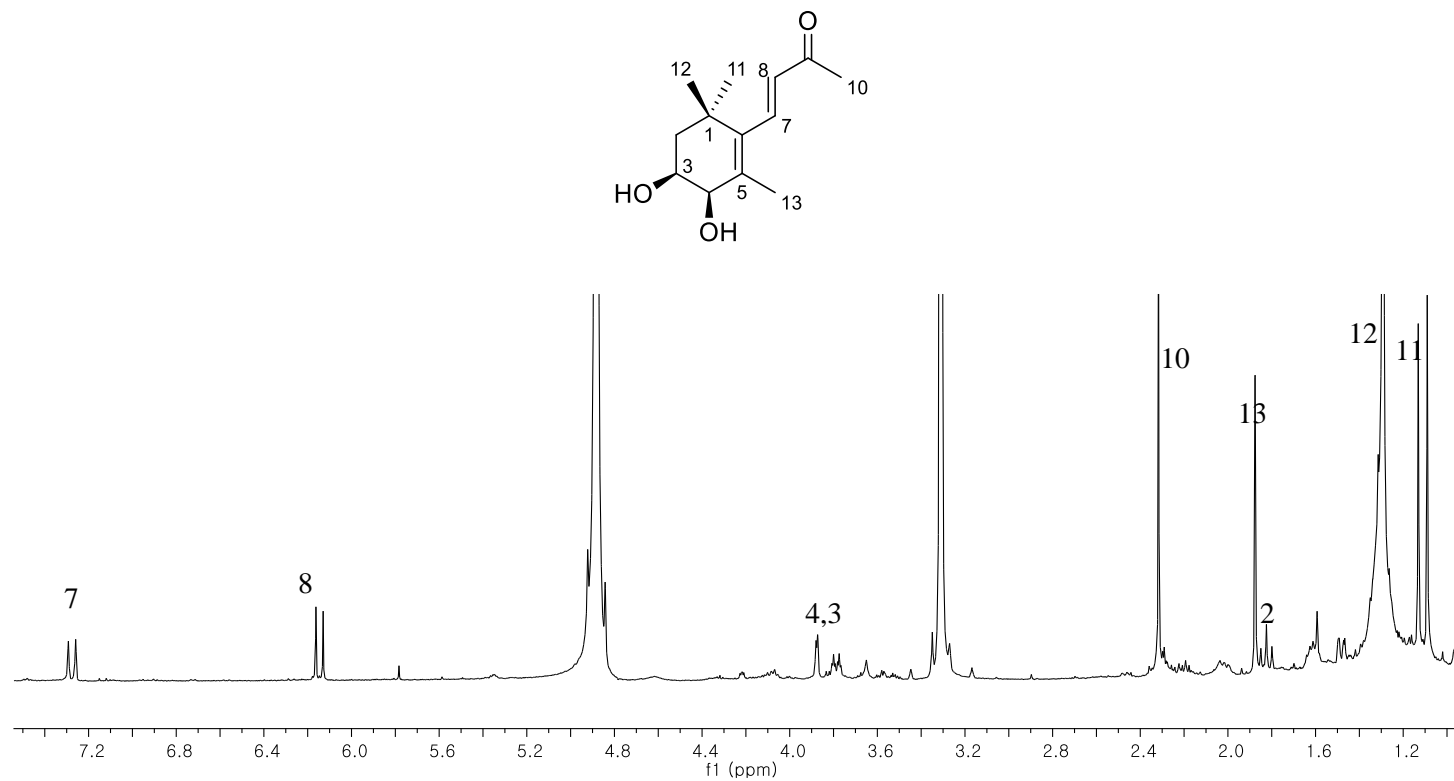


Fig. 101. ¹H-NMR spectrum of compound **33**

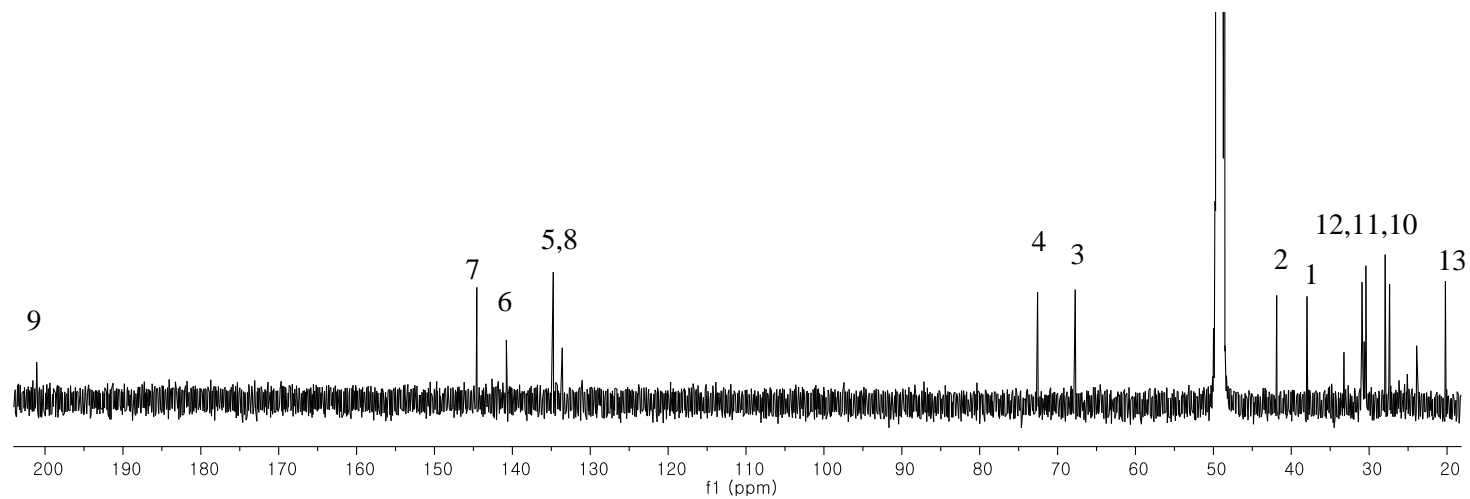
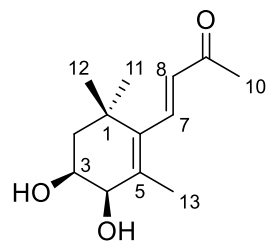


Fig. 102. ^{13}C -NMR spectrum of compound **33**

1.24 화합물 **34**, **35**, **36**의 구조

화합물 **34**는 무색무정형 분말 형태이며 HRESIMS [m/z 409.1852 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{19}H_{30}O_8Na$, 409.1838)]를 통해 분자식 $C_{19}H_{30}O_8$ 을 구하였다. NMR spectra가 화합물 **33**과 거의 유사하며 1D NMR spectra에서 ketone기 (δ_C 197.7) 하나, 두 쌍의 aromatic group [δ_C/δ_H 144.3/7.28 (1H, d, $J = 16.4$ Hz), 141.4, 134.8/6.14 (1H, d, $J = 16.4$ Hz), 132.5], 두 개의 oxygenated signal [δ_C/δ_H 75.8/4.02 (1H, dt, $J = 12.8, 3.5$ Hz), 70.1/4.13 (1H, d, $J = 3.4$ Hz)], 4차 carbon 하나 (δ_C 37.0), methylene group 하나 [δ_C/δ_H 40.2/1.94 (1H, d, $J = 12.6$ Hz), 1.65 (1H, dd, $J = 12.4, 3.2$ Hz)], 네 개의 methyl기 [δ_C/δ_H 30.0/1.15 (3H, s), 27.9/2.32 (3H, s), 27.3/1.10 (3H, s), 20.2/1.89 (3H, s)]로 3,4-dihydroxy-5,7-megastigmadien-9-one 부분구조를 동정하였고, anomeric signal [δ_C 102.9/ δ_H 4.51 (1H, d, $J = 7.8$ Hz)] 과 다섯 개의 carbon 피크로 (δ_C 78.2, 78.1, 75.4, 71.7, 62.8), 하나의 glucose가 존재하는 것을 알 수 있다. 문헌과의 비교로 화합물 **34**를 komaroveside A로 동정하였다 (Lee et al., 2011).

화합물 **35**와 **36**은 무색 무정형 분말 형태이며 분자식이 모두 $C_{19}H_{30}O_8$ 이다 [35: m/z 409.1858 $[M+Na]^+$, 36: m/z 409.1851 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{19}H_{30}O_8Na$, 409.1838)]. **35**의 1H NMR spectrum에서 두 개의 aromatic proton [δ_H 5.87 (1H, m), 5.86 (2H, m)], anomeric proton [δ_H 4.34 (1H, d, $J = 7.8$ Hz)], oxygenated proton 하나 [δ_H 4.42 (1H, m)], 두 개의 methylene proton [δ_H 2.53 (1H, d, $J = 17.0$ Hz), 2.15 (1H, dd, $J = 17.0$ Hz)] 그리고 네 개의 methyl기

[δ_{H} 1.29 (3H, d, J = 6.4 Hz), 1.03 (3H, s), 1.04 (3H, s), 1.92 (3H, d, J = 1.2 Hz)]를 확인하였다. ^{13}C NMR spectrum에서 ketone기 (δ_{C} 201.3), 네 개의 aromatic carbon (δ_{C} 167.4, 135.4, 131.6, 127.3), anomeric carbon (δ_{C} 102.8), 일곱 개의 oxygenated carbon (δ_{C} 80.1, 78.2, 78.1, 77.4, 75.3, 71.7, 62.9), 두 개의 methine 기 (δ_{C} 50.8, 42.5) 그리고 네 개의 methyl기 (δ_{C} 24.8, 23.5, 21.3, 19.7)를 확인할 수 있다. 문헌 치와의 비교를 통해 구조를 roseoside로 동정하였다 (Andersson and Lundgren, 1988). **36**의 NMR spectra는 **35**와 거의 유사하며, methyl기의 chemical shift만 약간 차이가 있다 (δ_{C} 24.8, 23.5, 22.4, 19.7). 6번 위치의 절대구조는 CD spectrum을 통해 동정할 수 있는데, **35**, **36** 둘 다 245 nm에서 positive cotton effect를 보이므로 *S*로 동정하였다 (Yamano and Ito, 2005). 이상의 결과로 화합물 **35**를 6*S*,9*R*-roseoside, **36**를 6*S*,9*S*-roseoside로 동정하였다.

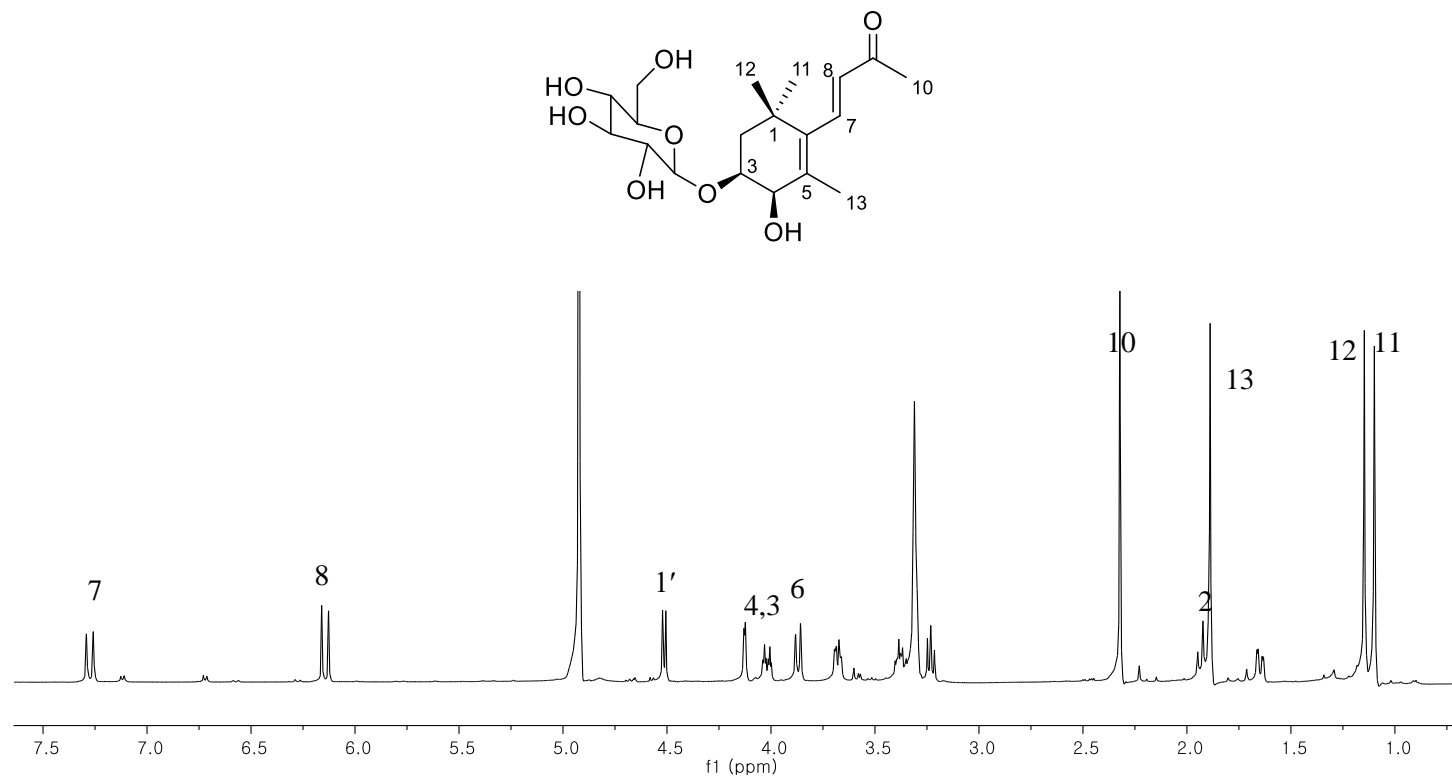


Fig. 103. ¹H-NMR spectrum of compound **34**

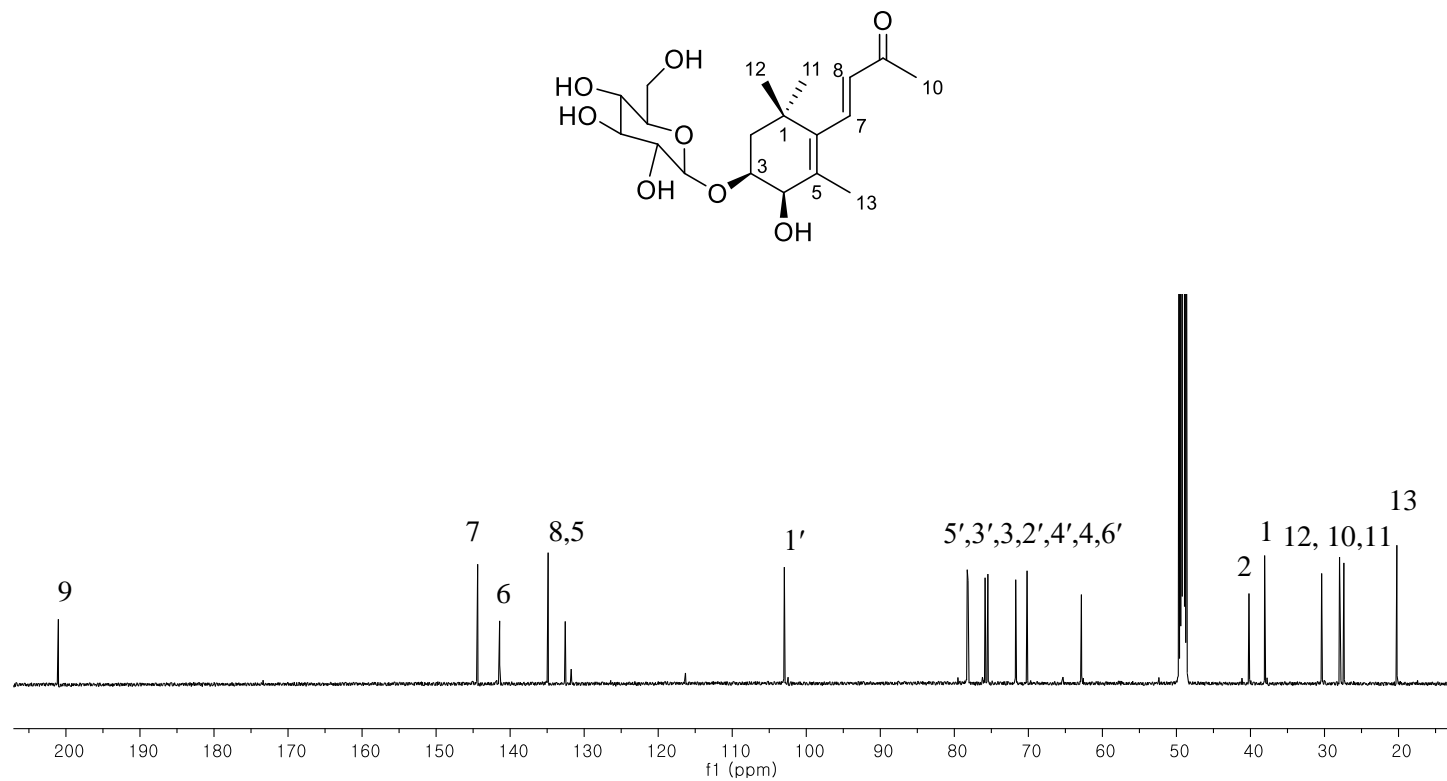


Fig. 104. ^{13}C -NMR spectrum of compound **34**

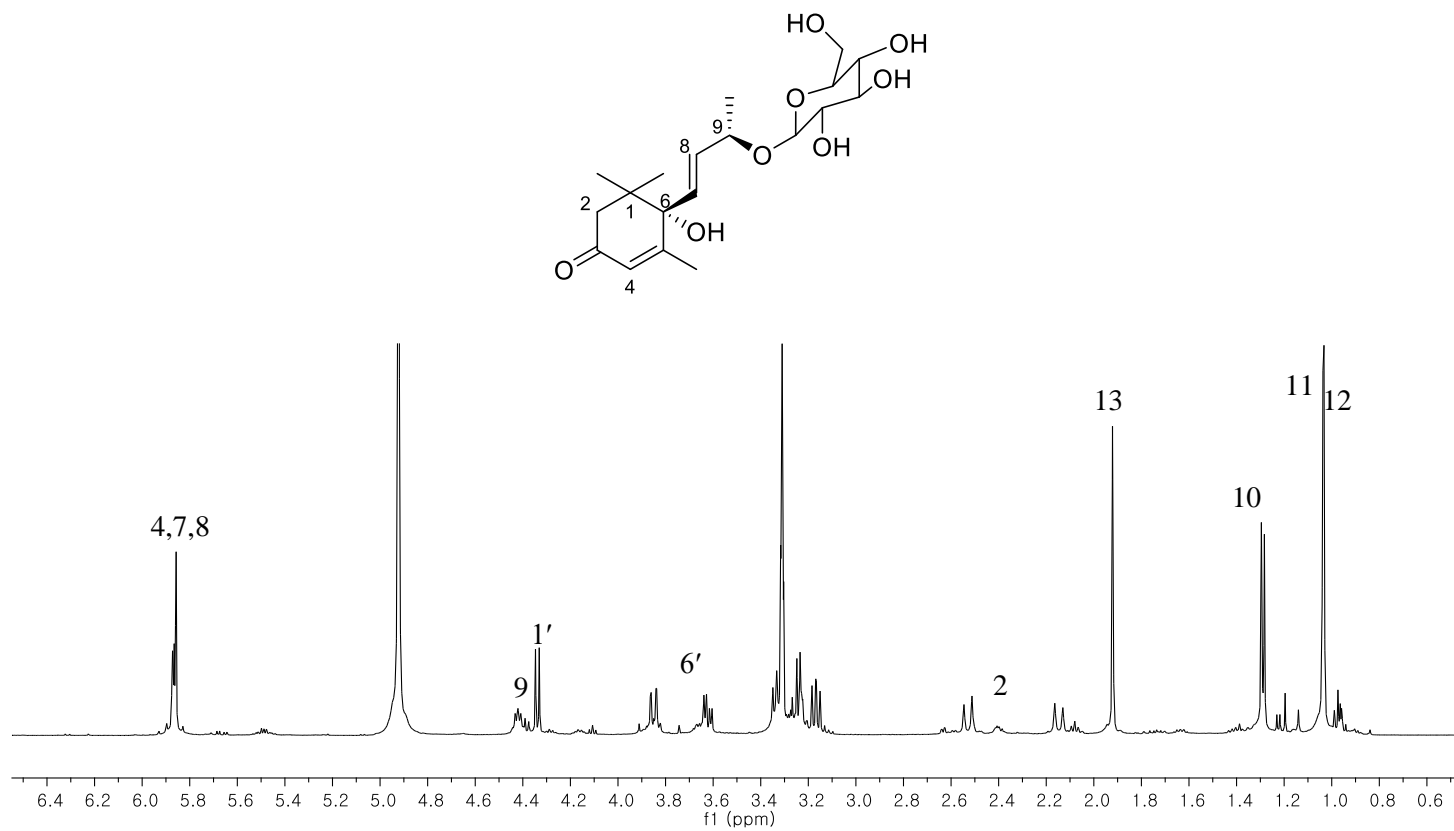


Fig. 105. ^1H -NMR spectrum of compound **35**

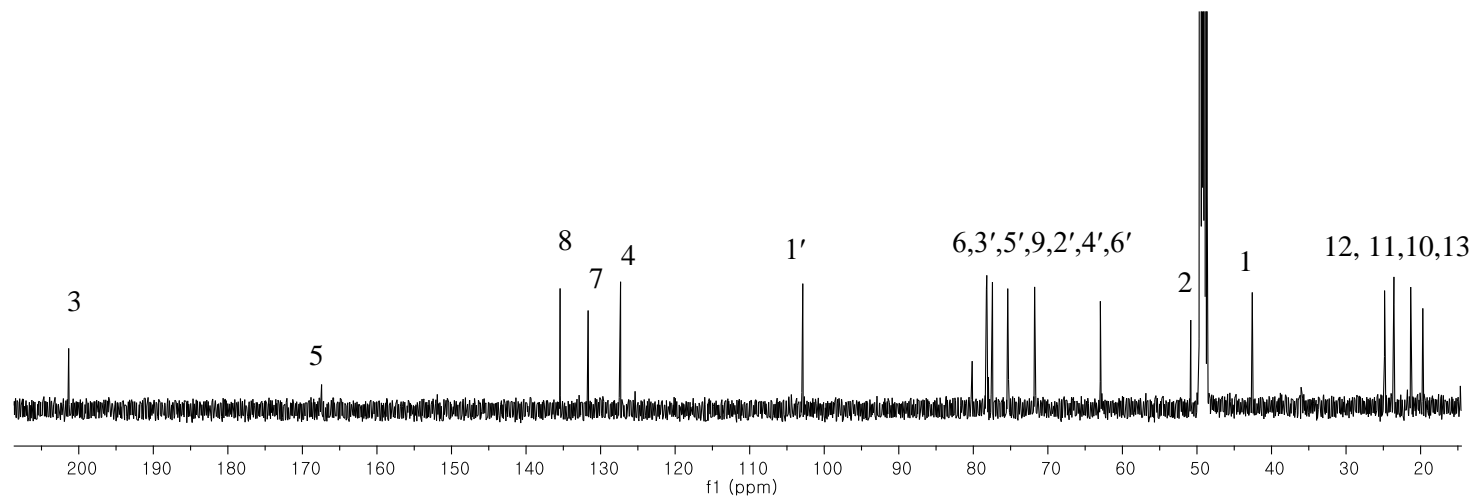
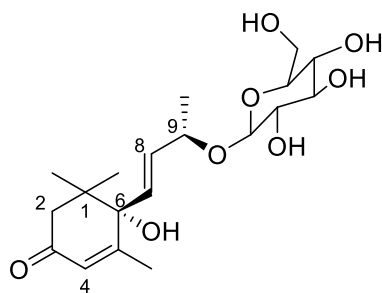


Fig. 106. ^{13}C -NMR spectrum of compound **35**

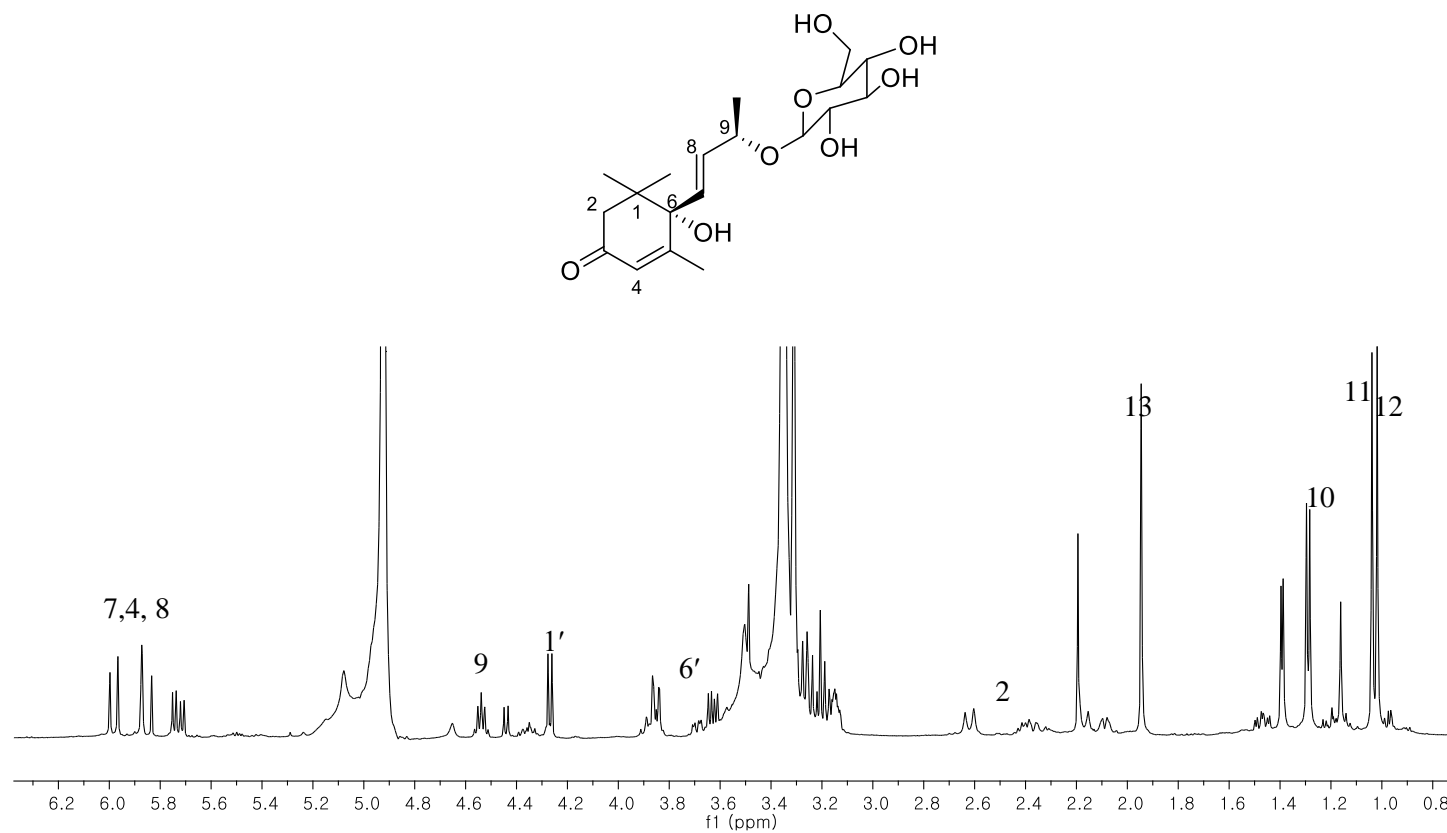


Fig. 107. ^1H -NMR spectrum of compound **36**

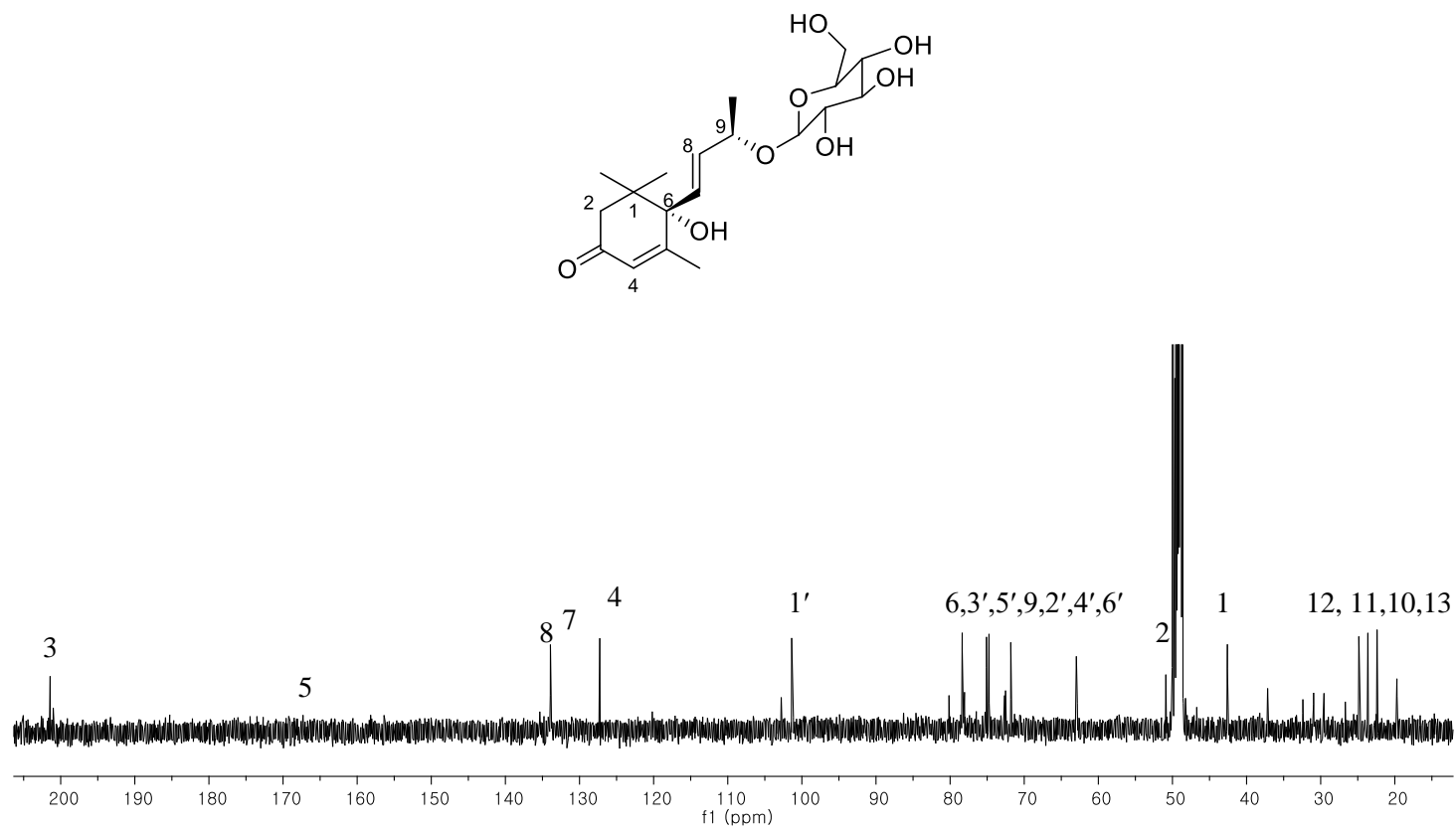


Fig. 108. ^{13}C -NMR spectrum of compound **36**

1.25 화합물 **37**, **48**의 구조

화합물 **37**은 무색 무정형 분말이며 HRMS값 [m/z 195.0650 $[M+H]^+$ (calcd. for $C_{10}H_{11}O_4$, 195.0657)]을 통해 분자식 $C_{10}H_{10}O_4$ 을 동정하였다. 1H NMR spectrum에서 δ_H 7.03 (1H, d, $J = 1.5$ Hz), 6.94 (1H, dd, $J = 8.1, 1.5$ Hz), 6.77 (1H, d, $J = 8.1$ Hz), 7.54 (1H, d, $J = 15.9$ Hz), 6.26 (1H, d, $J = 15.9$ Hz), 3.76 (3H, s)를 통해서 하나의 1,3,4-치환체, 하나의 double bond, methoxyl기 하나의 존재를 알 수 있다. ^{13}C NMR spectrum에서 δ_C 169.9, 149.7, 147.0, 146.9, 127.8, 123.0, 116.6, 115.2, 114.9을 통해 cinnamic acid와 methoxyl기 (δ_C 52.1)를 확인할 수 있다. 이상의 데이터와 문헌과 비교를 통해 화합물 **37**을 methyl 3,4-dihydroxycinnamate로 동정하였다 (Lee et al., 2013).

화합물 **48**은 갈색 분말로서 분자식 $C_9H_9O_3$ 을 갖는다 [m/z 127.3090 $[M+H]^+$ (calcd. for $C_9H_{10}O_3$, 127.3095)]. 1D NMR spectra에서 하나의 aldehyde기 [δ_C/δ_H 179.59/9.54 (1H, s)], 네 개의 aromatic signal [δ_C/δ_H 163.3/154.0, 124.8/7.39 (1H, d, $J = 3.6$ Hz), 111.0/6.59 (1H, d, $J = 3.6$ Hz)] 그리고 oxygenated methylene기 하나 [δ_C/δ_H 57.8/4.61 (2H, s)]가 보인다. 문헌치와의 비교를 통해 **48**을 5-(hydroxymethyl) furfural로 동정하였다 (Yan et al., 2015).

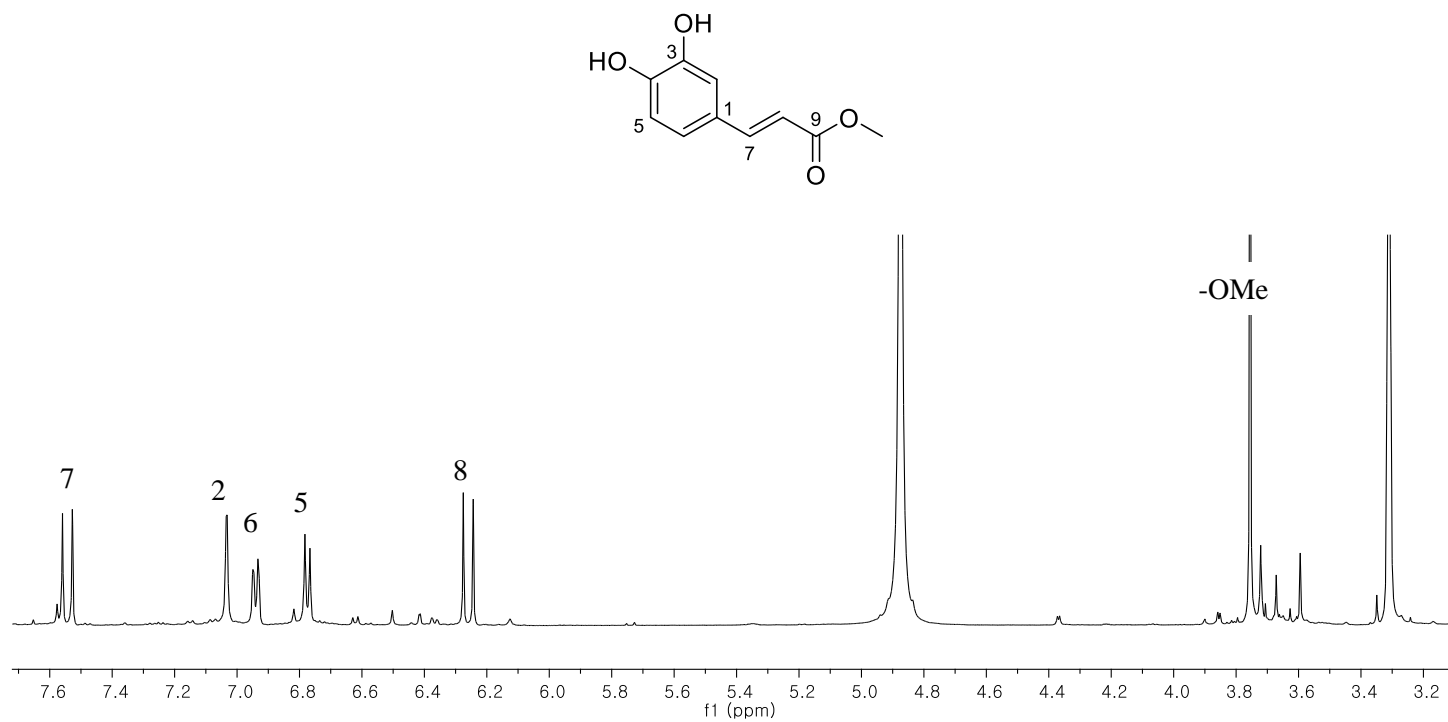


Fig. 109. ^1H -NMR spectrum of compound **37**

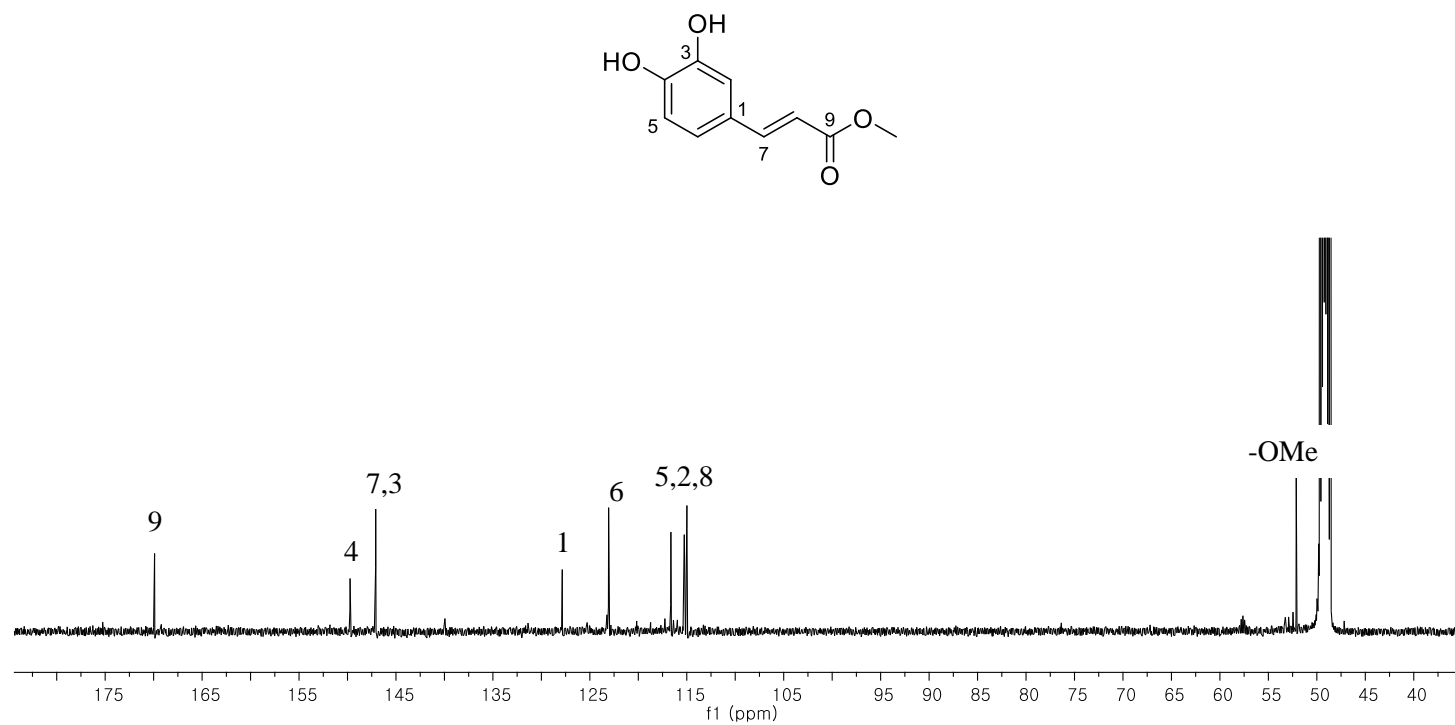


Fig. 110. ^{13}C -NMR spectrum of compound **37**

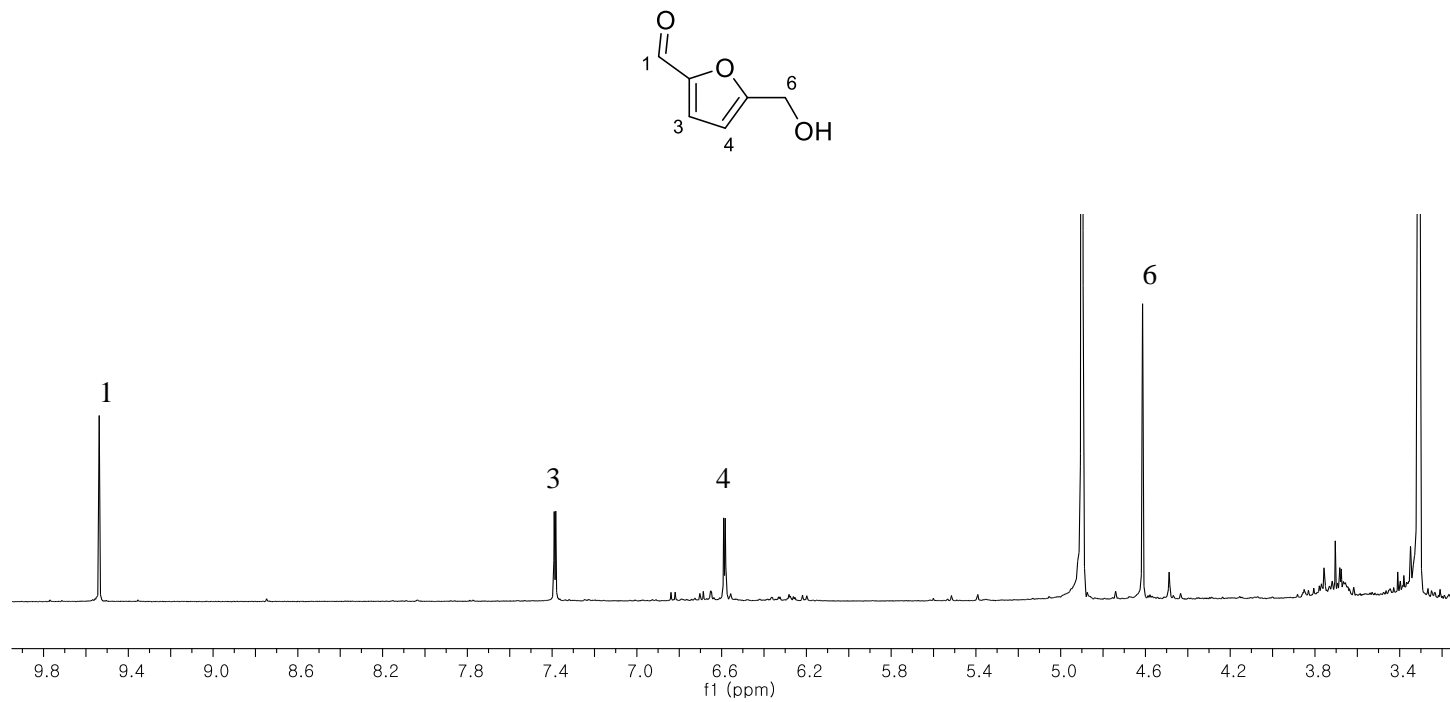


Fig. 111. ^1H -NMR spectrum of compound **48**

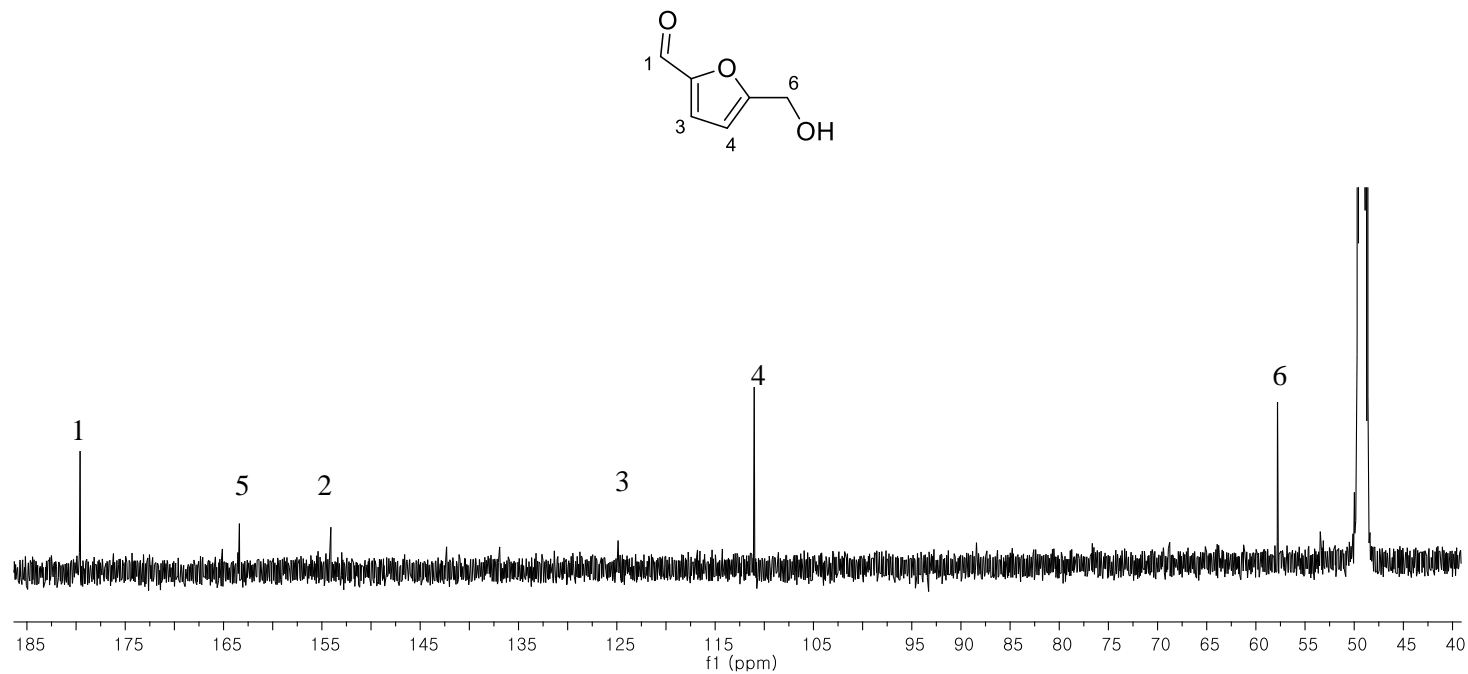


Fig. 112. ^{13}C -NMR spectrum of compound **48**

1.26 화합물 **39**, **40**의 구조

화합물 **39**과 **40**은 갈색무정형 형태로 각각의 HRESIMS [**39**: m/z 241.1082 $[M+HCOO]^-$ (calcd. for $C_{12}H_{17}O_5$, 241.1076), **40**: m/z 195.1028 $[M-H]^-$ (calcd. for $C_{11}H_{15}O_3$, 195.1021)]를 통하여 같은 분자식 $C_{11}H_{16}O_3$ 을 동정하였다. **39**의 1H NMR spectrum에서 하나의 aromatic proton [δ_H 5.75 (1H, s)], 하나의 oxygenated proton [δ_H 4.22 (1H, m)], 두 개의 methylene signal [δ_H 2.42 (1H, d, $J = 13.6$ Hz), 1.99 (1H, d, $J = 14.4$ Hz), 1.75 (1H, m), 1.53 (1H, m)] 그리고 세 개의 methyl기 [δ_H 1.76 (3H, s), 1.47 (3H, s), 1.28 (3H, s)]를 확인할 수 있다. ^{13}C NMR spectrum에서 carboxyl기 하나 (δ_C 185.8), 두 개의 aromatic carbon (δ_C 174.5, 113.4), 두 개의 oxygenated carbon (δ_C 89.1, 67.3), 세 개의 methine carbon (δ_C 48.1, 46.5, 37.3) 그리고 세 개의 methyl기 (δ_C 31.1, 27.5, 27.1)를 확인할 수 있다. 문헌치와의 비교를 통해 loliolide로 동정하였다 (Yan et al., 2013).

화합물 **40**의 NMR spectra는 **39**와 거의 유사하지만 약간의 chemical shift가 다르다. 1H NMR spectrum에서 하나의 aromatic proton [δ_H 5.78 (1H, s)], 하나의 oxygenated proton [δ_H 4.10 (1H, tt, $J = 11.5, 4.2$ Hz)], 두 개의 methylene signal [δ_H 2.47 (1H, ddd, $J = 11.7, 3.9, 2.2$ Hz), 2.01 (1H, ddd, $J = 13.0, 4.2, 2.2$ Hz), 1.42 (1H, t, $J = 11.6$ Hz), 1.28 (1H, m)] 그리고 세 개의 methyl기 [δ_H 1.59 (3H, s), 1.31 (3H, s), 1.29 (3H, s)]를, ^{13}C NMR spectrum에서는 carboxyl기 하나 (δ_C 184.0), 두 개의 aromatic carbon (δ_C 174.1, 113.8), 두 개의 oxygenated carbon (δ_C 88.7, 65.4), 세 개의 methine carbon (δ_C 50.9, 50.0, 36.3)

그리고 세 개의 methyl기 (δ_c 30.4, 25.9, 25.4)를 확인할 수 있다. 문헌과의 비교를 통해 화합물 **40**을 epilolide로 동정하였다 (Borkosky et al., 1996).

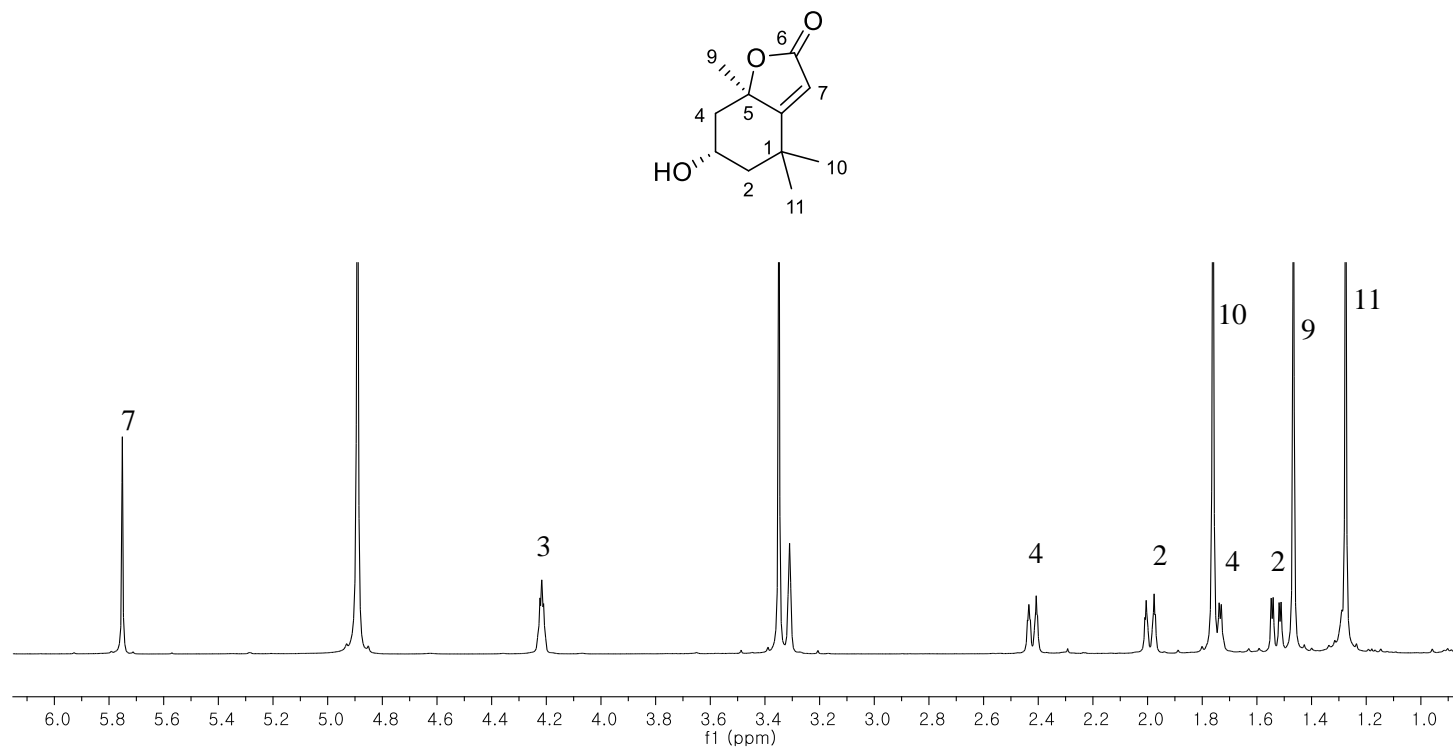


Fig. 113. ^1H -NMR spectrum of compound **39**

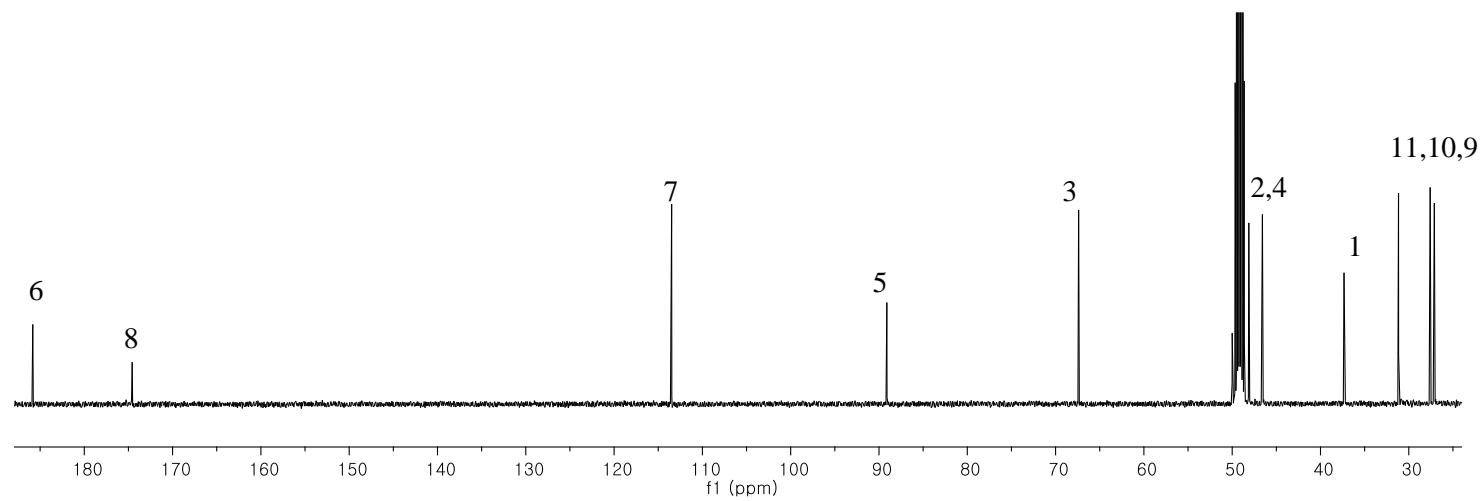
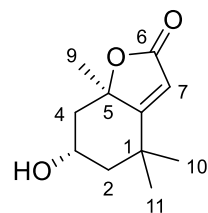


Fig. 114. ^{13}C -NMR spectrum of compound **39**

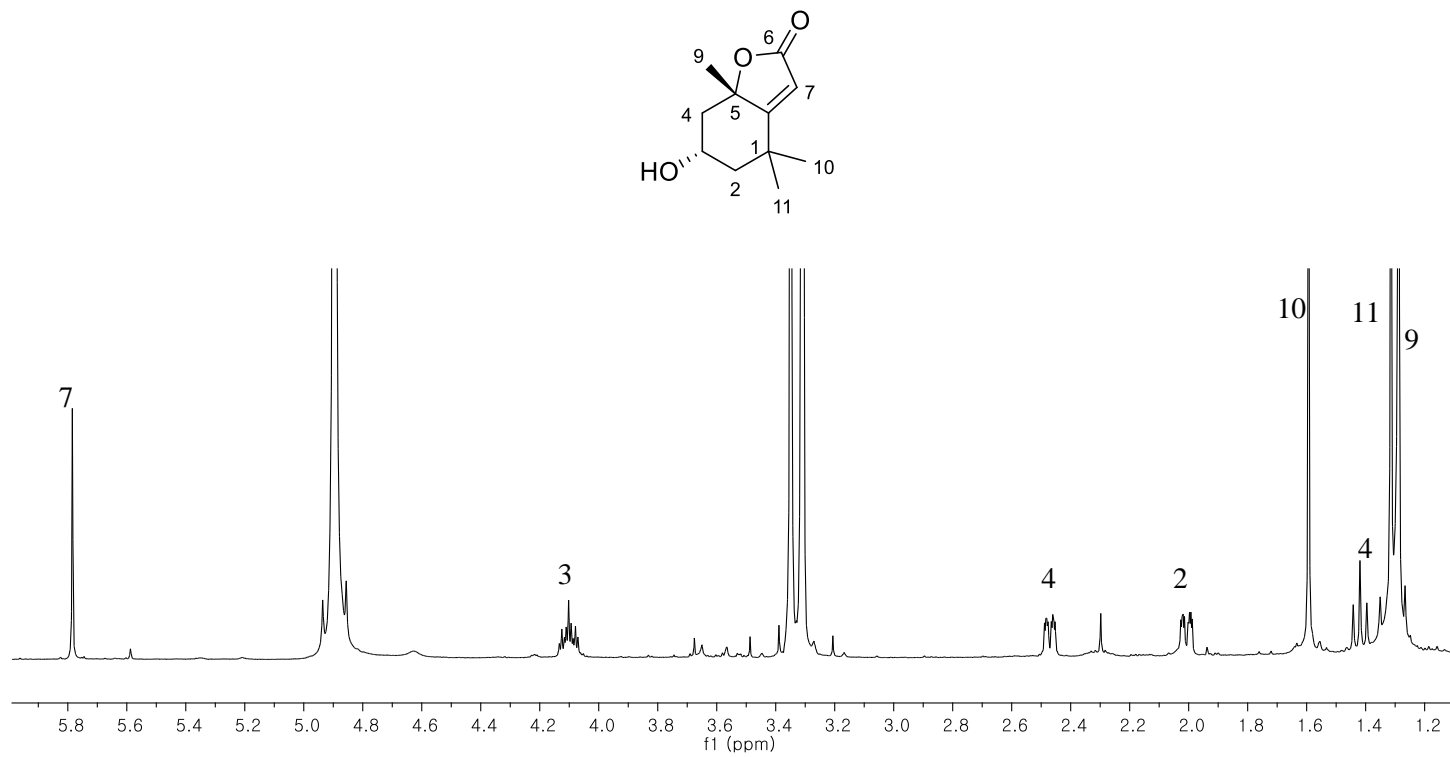


Fig. 115. ¹H-NMR spectrum of compound **40**

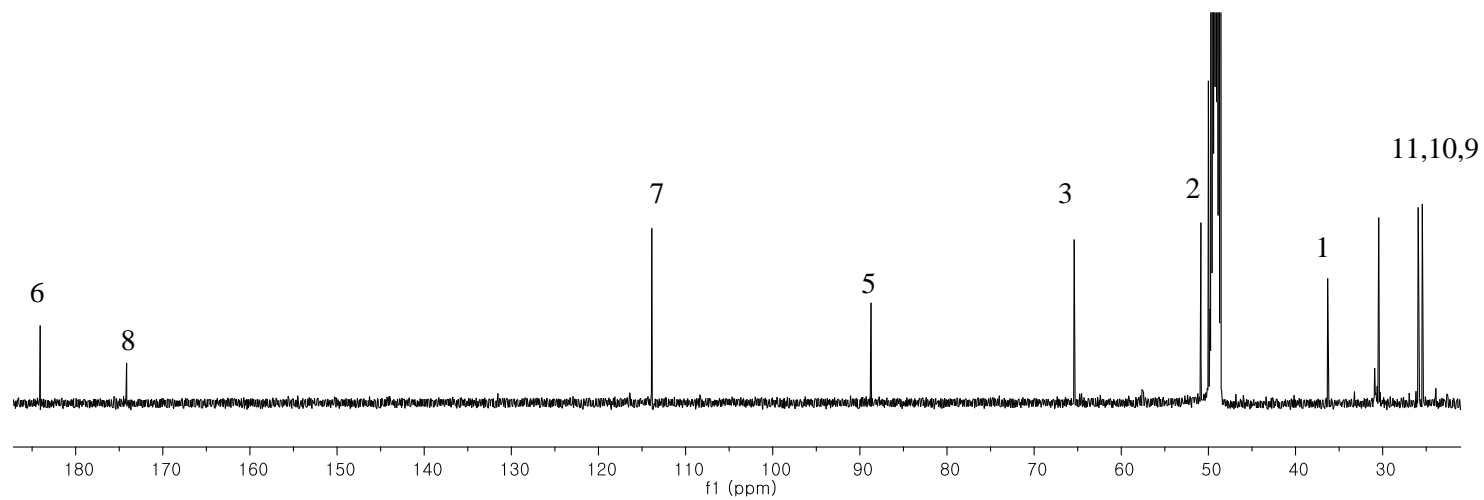
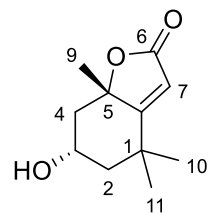


Fig. 116. ^{13}C -NMR spectrum of compound **40**

1.27 화합물 43의 구조

갈색분말 성상의 화합물 43은 MS 값 [m/z 268.1052 $[M+H]^+$ (calcd. for $C_{10}H_{14}N_5O_4$, 268.1046)]에 의해 분자식 $C_{15}H_{16}O_9$ 을 동정하였다. 1H , ^{13}C NMR spectra에서 아홉 개의 aromatic 피크 [δ_C/δ_H 163.7, 150.5, 149.7, 145.7/7.83 (1H, d, $J = 9.5$ Hz), 145.6, 115.4, 114.8/6.29 (1H, d, $J = 9.5$ Hz), 114.0/7.04 (1H, s), 105.4/7.20 (1H, s)]와 하나의 당 moiety [δ_C/δ_H 103.1/4.99 (1H, d, $J = 7.3$ Hz), 78.6, 77.5, 74.8, 71.3, 62.4]을 확인하였다. 1H NMR spectrum에서 coumarin의 특징적인 패턴을 확인하여, 이 화합물이 coumarin 구조에 glucose 하나가 결합되어 있는 구조임을 추정할 수 있다. 이상의 데이터와 문헌과의 비교로 화합물 43을 aesculetin-7-*O*- β -D-glucopyranoside (cichoriin)로 동정하였다 (Kuwajima et al., 1992).

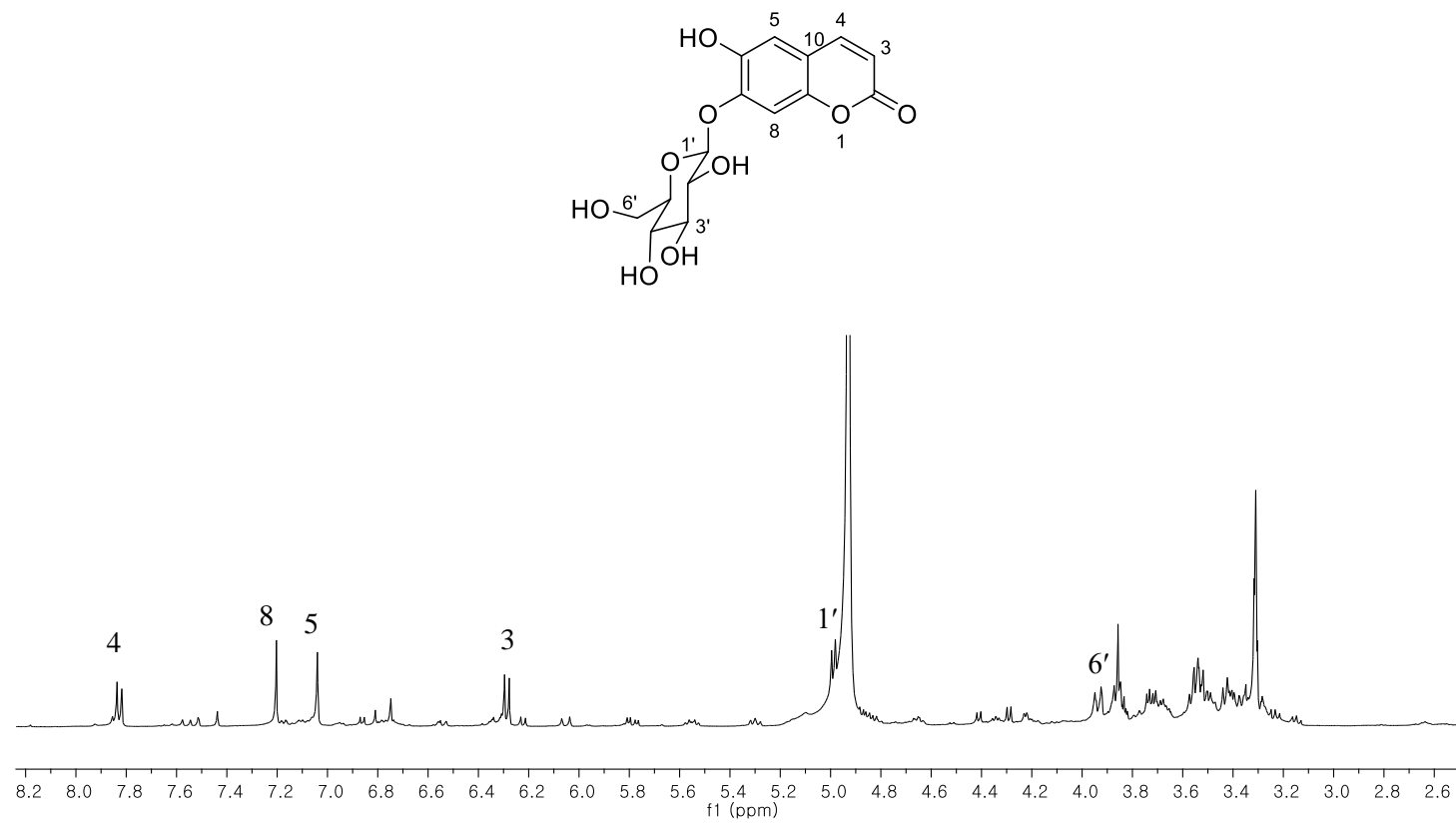


Fig. 117. ^1H -NMR spectrum of compound **43**

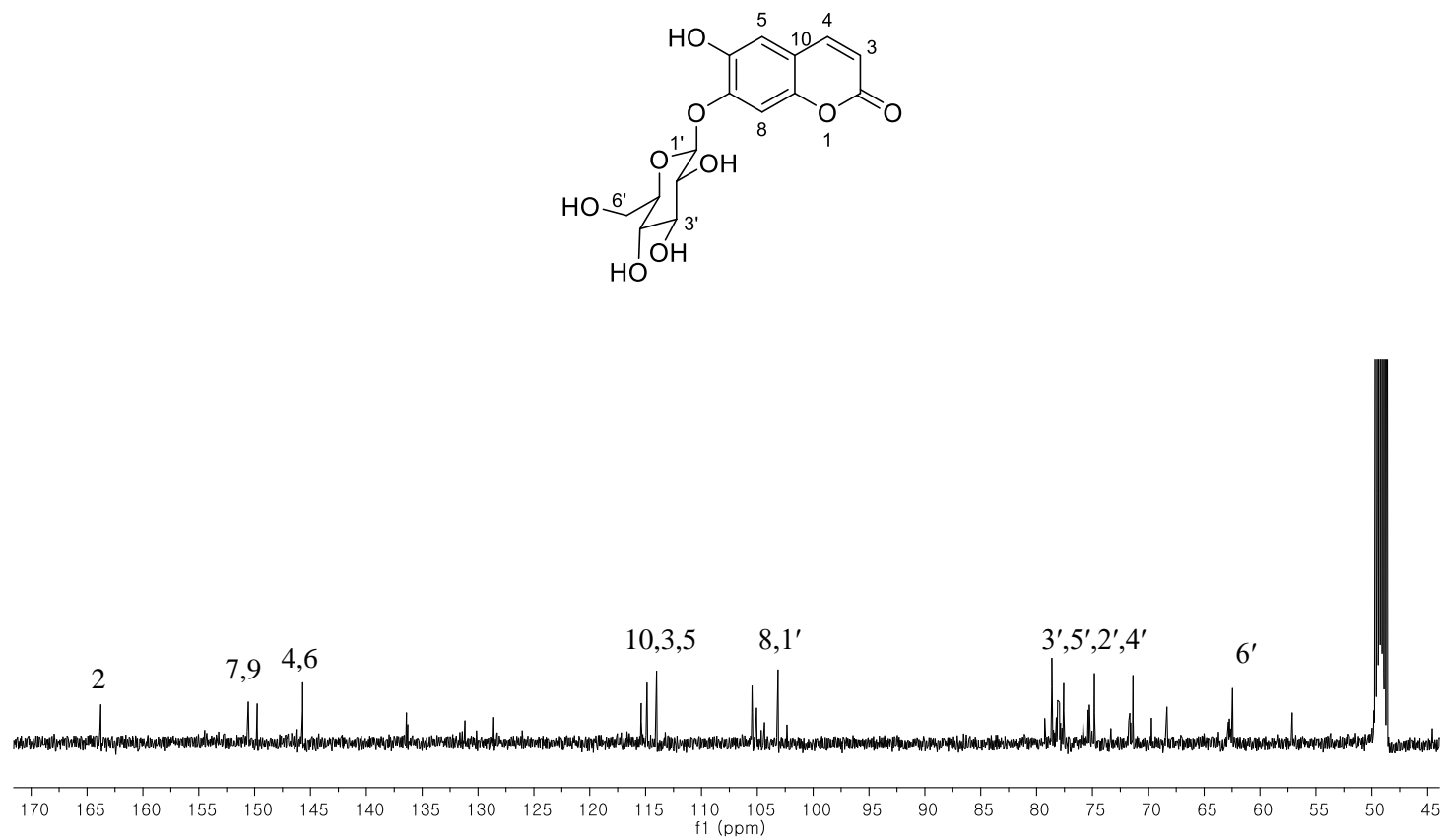


Fig. 118. ^{13}C -NMR spectrum of compound **43**

1.28 화합물 **44**, **45**의 구조

화합물 **44**와 **45**의 성상은 갈색무정형 분말이다. 각각의 HRESIMS 값 [**44**: m/z 395.1330 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{17}H_{24}O_9Na$, 395.1318), **45**: m/z 397.1492 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{17}H_{26}O_9Na$, 397.1475)] 에 의해 분자식 $C_{17}H_{24}O_9$ 과 $C_{17}H_{26}O_9$ 를 동정하였다. **44**의 1H NMR spectrum에서 1,3,4,5-치환체 [δ_H 6.75 (2H, s)], 한 쌍의 aromatic proton [δ_H 6.55 (1H, d, $J = 15.9$ Hz), 6.33 (1H, dt, $J = 15.9, 5.6$ Hz)], oxygenated proton 하나 [δ_H 4.23 (2H, dd, $J = 5.6, 1.5$ Hz)] 그리고 methoxyl기 두 개 [δ_H 3.86 (6H, s)]를 확인하였다. ^{13}C NMR spectrum에서 여섯 개의 aromatic carbon (δ_C 154.4, 135.9, 135.3, 131.4, 130.1, 105.5), oxygenated carbon (δ_C 63.7) 그리고 methoxyl기 하나 (δ_C 57.1)를 확인 할 수 있었다. 그 외 하나의 당 moiety [δ_C/δ_H 105.4/4.88 (1H, d, $J = 7.6$ Hz), 78.5, 77.9, 75.8, 71.4, 62.6]를 확인할 수 있었고, 문헌치와 비교를 통해 화합물 **44**를 syringin으로 동정하였다 (Luyen et al., 2015).

화합물 **45**의 구조는 **44**과 거의 유사하며, 1H NMR spectrum에서 1, 3, 4, 5-치환체 [δ_H 6.55 (2H, s)], oxygenated proton 하나 [δ_H 3.57 (2H, t, $J = 6.4$ Hz)], 두 개의 aliphatic proton [δ_H 2.64 (2H, m), 1.83 (2H, m)] 그리고 methoxyl기 두 개 [δ_H 3.83 (6H, s)]를 확인하였다. 체인 부분이 aliphatic chain으로 바뀌었으며, 문헌과의 비교로 화합물 **45**의 구조를 dihydrosyringin으로 동정하였다 (Luyen et al., 2015).

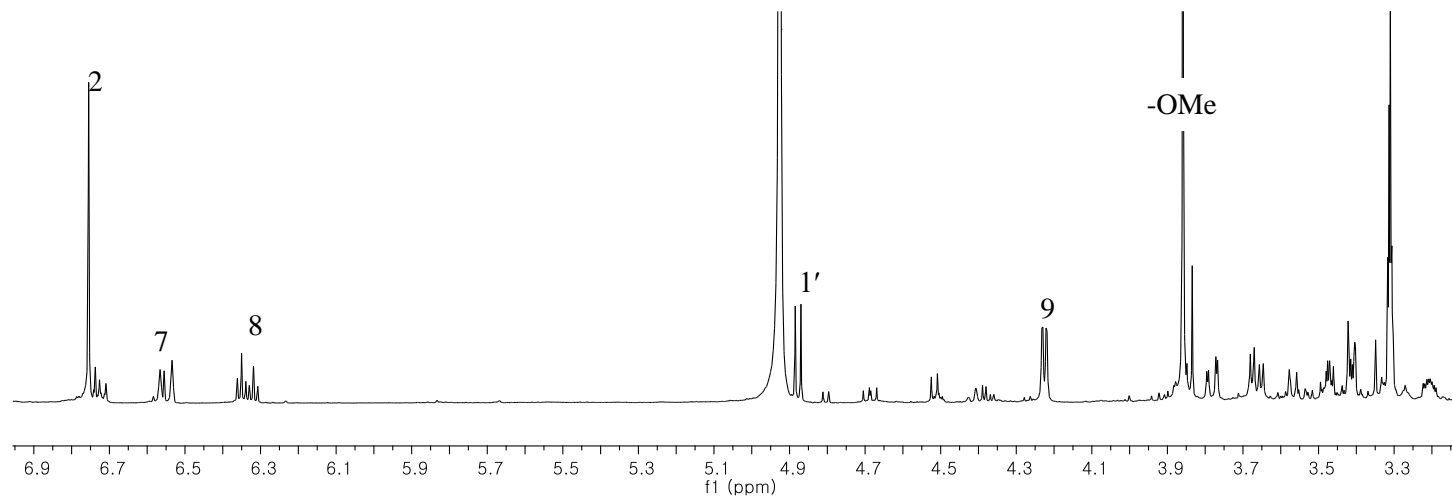
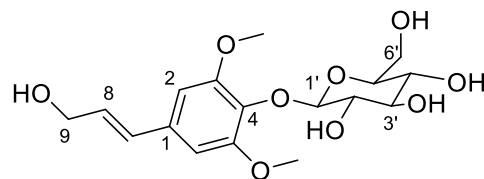


Fig. 119. ^1H -NMR spectrum of compound **44**

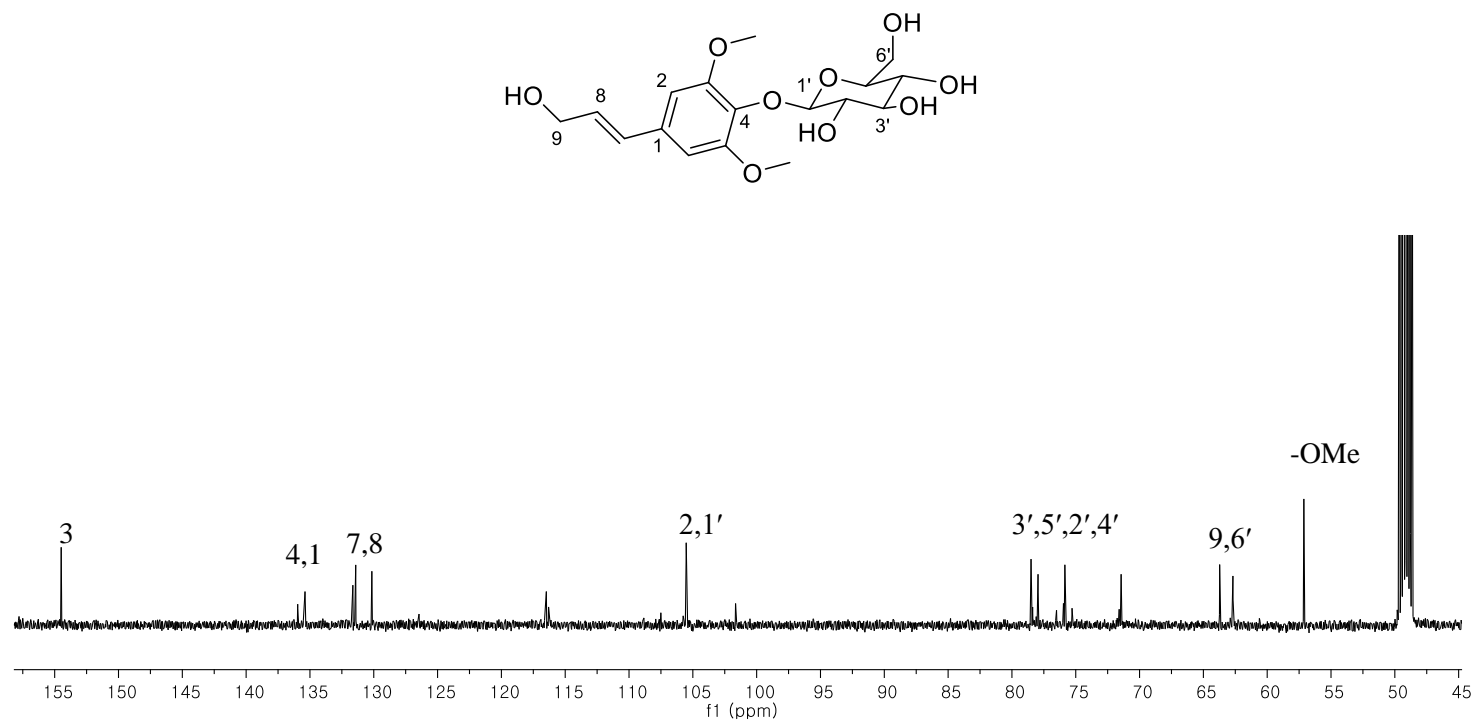


Fig. 120. ^{13}C -NMR spectrum of compound **44**

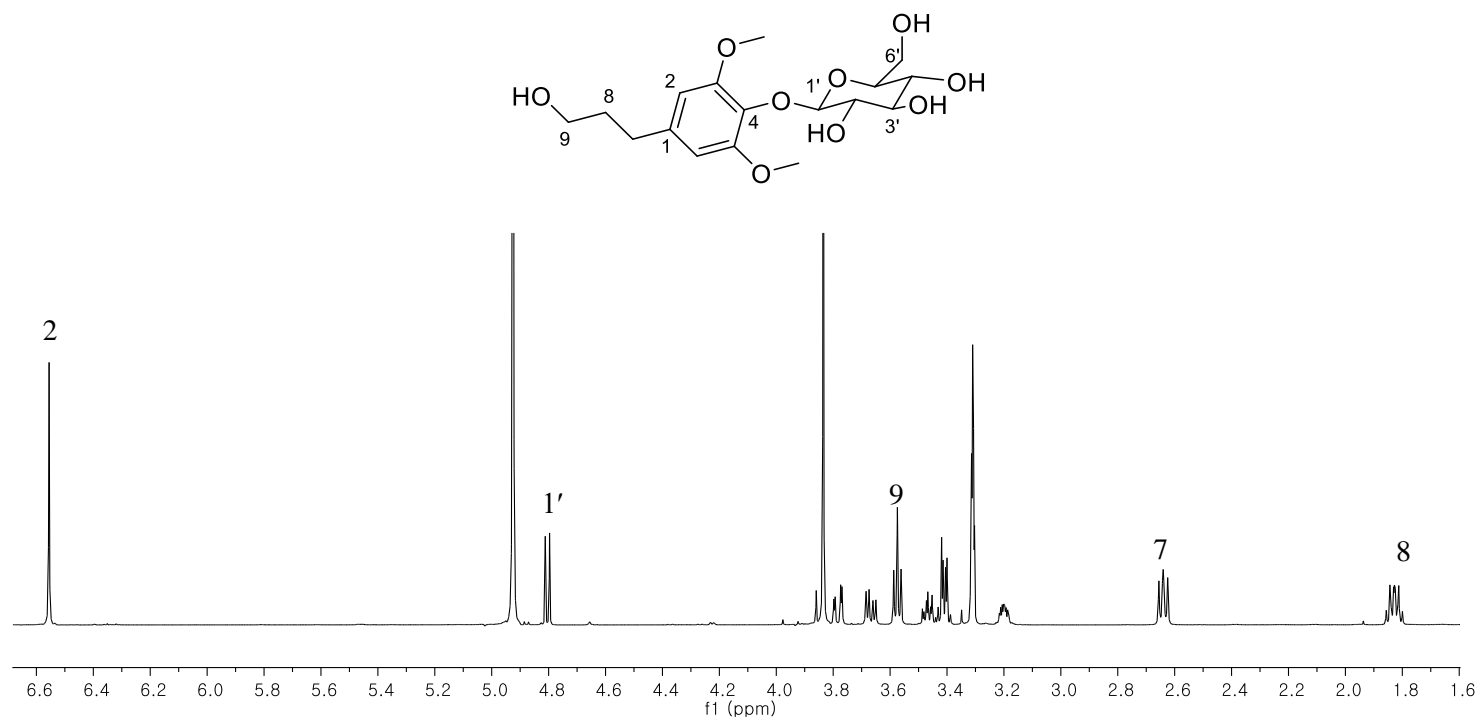


Fig. 121. ¹H-NMR spectrum of compound **45**

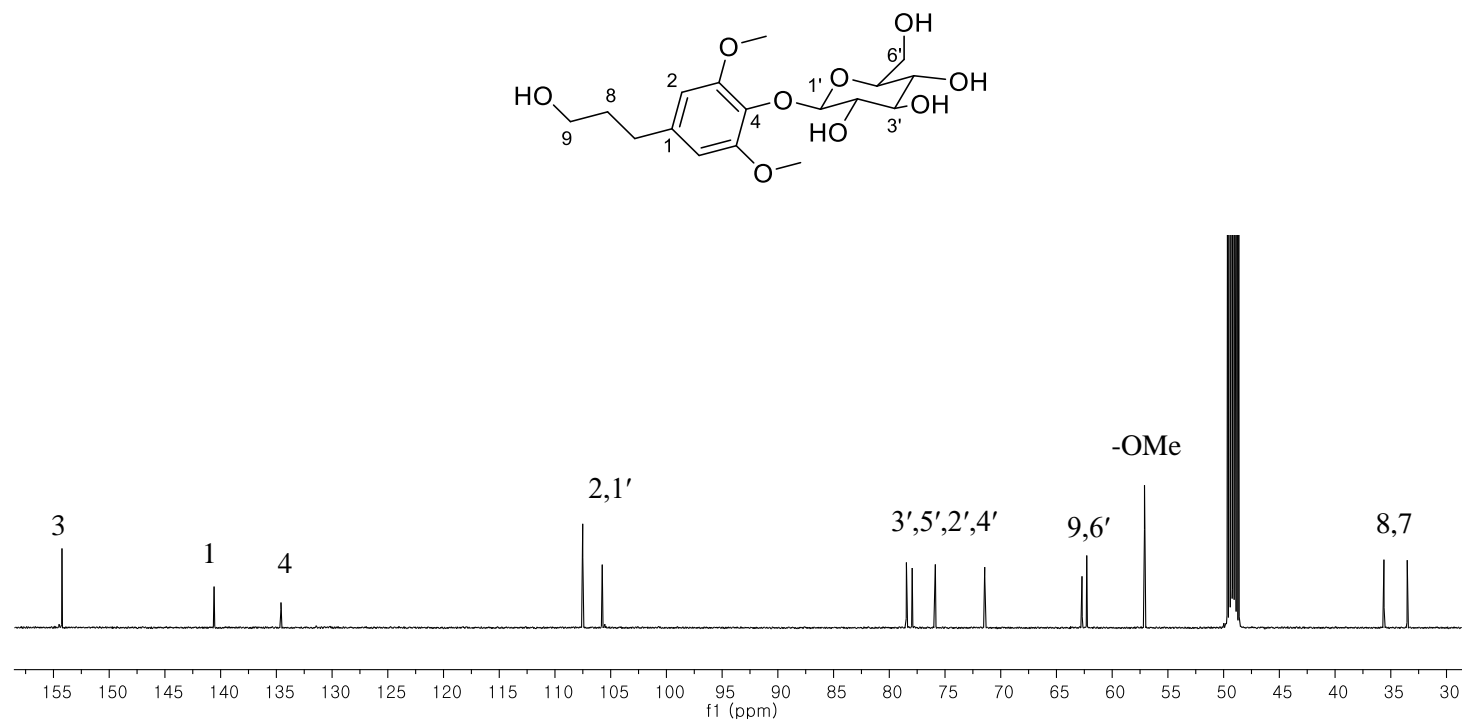


Fig. 122. ^{13}C -NMR spectrum of compound **45**

1.29 화합물 **38**, **41**, **42**, **46**, **47**, **49**의 구조

화합물 **38** 의 분자식은 MS 값 [m/z 198.0522 [$M+Na$]⁺ (calcd. for $C_{10}H_9NO_2Na$, 198.0531)]에 의해 $C_{10}H_9NO_2$ 로 동정하였다. 1H NMR spectrum 에서 indole alkaloid 의 특징을 보이며, 여섯 개의 aromatic proton [δ_H 8.35 (1H, s), 8.17 (1H, d, $J = 7.3$ Hz), 7.48 (1H, d, $J = 7.3$ Hz), 7.48 (1H, d, $J = 7.3$ Hz), 7.22 (1H, m), 7.19 (1H, m)]과 oxygenated proton 하나 [δ_H 4.94 (1H, s)]를 확인할 수 있다. ^{13}C NMR spectrum 에서 ketone 기 하나 (δ_C 194.3), 여덟 개의 aromatic carbon (δ_C 136.2, 133.3, 125.4, 122.7, 121.7, 121.1, 113.1, 112.1) 그리고 methoxyl 기 (δ_C 65.2)를 확인하였고 문헌과의 비교를 통해 화합물 **38** 을 glycerindole 로 동정하였다 (Wang et al., 2014).

갈색무정형 분말 화합물 **41** 은 분자식 $C_6H_6N_2O$ 을 갖는다 [m/z 123.0557 [$M+H$]⁺ (calcd. for $C_6H_7N_2O$, 123.0558)]. 1D NMR spectra 에서 하나의 carbonyl 기 (δ_C 169.9), 다섯 개의 aromatic signal [δ_C/δ_H 152.9/8.69 (1H, d, $J = 4.0$ Hz), 149.6/ 9.03 (1H, s), 137.5/8.29 (1H, m), 131.5, 125.3/7.55 (1H, ddd, $J = 8.0, 4.9, 0.5$ Hz)]을 보인다. 문헌과의 비교를 통해 nicotinamide 구조를 동정하였다 (Yamashita et al., 1989).

갈색무정형 분말 화합물 **42**의 분자식 $C_{10}H_{13}N_5O_4$ 이다 [m/z 268.1052 [$M+H$]⁺ (calcd. for $C_{10}H_{14}N_5O_4$, 268.1046)]. 1H , ^{13}C , HSQC NMR spectra를 통해 다섯 개의 aromatic signal [δ_C/δ_H 157.7, 153.6/ 8.18 (1H, s), 150.1, 142.1/ 8.32 (1H, s), 121.1], 하나의 pentose moiety [δ_C/δ_H 91.4/ 5.96 (1H, d, $J = 6.5$ Hz), 88.3/4.17 (1H, dd, $J = 5.0, 2.5$ Hz), 75.6/ 4.74 (1H, dd, $J = 6.4, 5.2$ Hz), 72.8/ 4.32

(1H, dd, $J = 5.0, 2.5$ Hz), 63.6/3.89 (1H, dd, $J = 12.5, 2.4$ Hz), 3.75 (1H, dd, $J = 12.6, 2.6$ Hz)]를 확인할 수 있다. 문헌치와의 비교를 통해 **42**를 adenosine으로 동정하였다 (Sun et al., 2015).

화합물 **46**은 황색무정형 분말로 분자식 $C_{12}H_{12}N_2O_2$ 을 갖는다 [m/z 217.0975 $[M+H]^+$ (calcd. for $C_{12}H_{13}N_2O_2$, 217.0977)]. 1H NMR spectrum에서 전형적 indole alkaloid signal인 [δ_H 7.44 (1H, d, $J = 7.8$ Hz), 7.32 (1H, d, $J = 7.8$ Hz), 7.06 (1H, t, $J = 7.8$ Hz), 6.98 (1H, t, $J = 7.8$ Hz)]와 두 개의 methylene [δ_H 4.17 (2H, d, $J = 15.4$ Hz), 3.11 (1H, dd, $J = 15.9, 4.5$ Hz), 2.78 (1H, dd, $J = 15.5, 10.5$ Hz)] 그리고 하나의 methine [δ_H 3.55 (1H, dd, $J = 10.9, 4.4$ Hz)]을 확인하였다. ^{13}C NMR spectra에서 indole alkaloid (δ_C 128.1, 106.8, 117.7, 118.7, 121.2, 111.1, 136.2, 126.7), carboxyl 기 하나 (δ_C 169.6), 세 개의 methine carbon (δ_C 56.7, 40.5, 23.1)을 확인하였다. 이상의 결과와 문헌을 비교하여 lycoperodine-1로 동정하였다 (Song et al., 2014).

화합물 **47**은 백색무정형분말로 분자량 m/z 144.0663 $[M+H]^+$ (calcd. for $C_6H_{10}NO_3$, 144.0661)로 분자식 $C_6H_9NO_3$ 을 구하였다. 1H , ^{13}C NMR spectra를 통해 두 개의 carbonyl기 (δ_C 182.2, 174.6), 세 개의 methine signal [δ_C/δ_H 57.1/ 4.30 (1H, dd, $J = 9.0, 4.4$ Hz), 30.4/2.33 (2H, m) and 25.9/2.47 (1H, m), 2.16 (1H, m)]과 methoxyl기 [δ_C/δ_H 53.0/ 3.76 (3H, s)]를 확인할 수 있다. 문헌치와의 비교로 화합물 **47**을 (S)-pyroglutamate로 동정하였다 (Barraclough et al., 2006).

화합물 **49**는 갈색분말 성상으로 분자식 $C_9H_{11}NO_2$ 을 갖는다

[m/z 166.0860 [$M+H$]⁺ (calcd. for C₉H₁₁NO₂, 166.0868)]. ¹H, ¹³C NMR spectra에
서 하나의 phenyl 기 [δ_C/δ_H 137.4, 130.5, 130.1, 128.5/7.28 – 7.39 (5H, m)],
carboxyl 기(δ_C 179.5), amino signal [δ_C/δ_H 57.7/4.61 (1H, s)] 그리고 methylene
signal [δ_C/δ_H 38.4/3.78 (1H, dd, J = 9.0, 4.3 Hz), 3.00 (1H, dd, J = 14.5, 9.0 Hz)]을
발견할 수 있다. 문헌치와의 비교에 의하여 구조를 phenylalanine로
동정하였다 (Xiong et al., 2002).

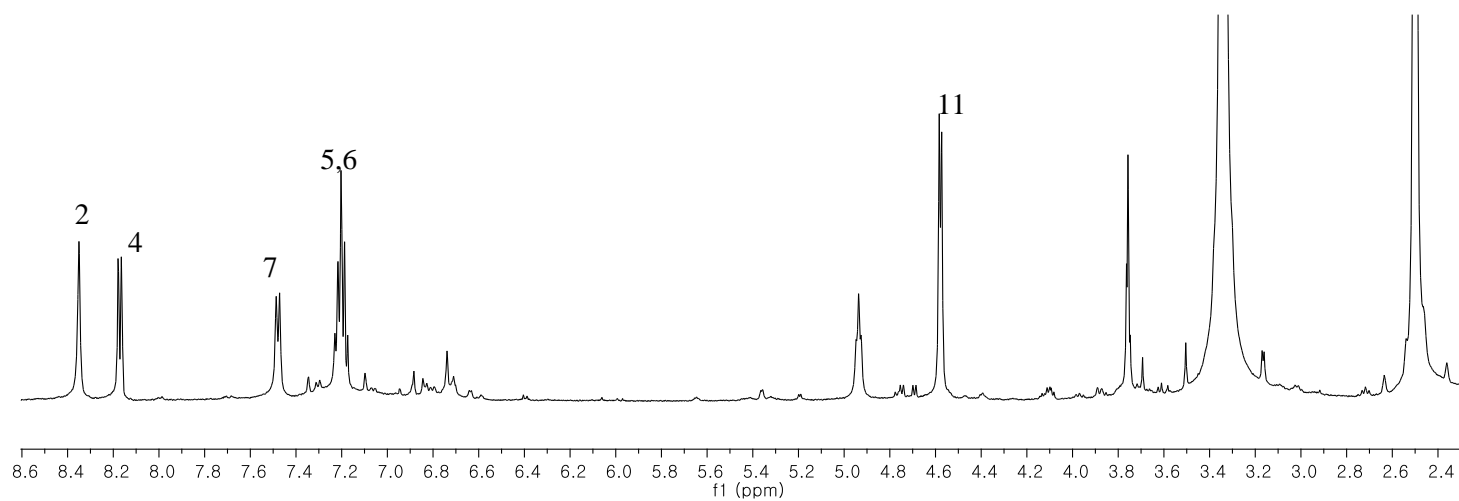
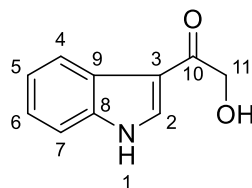


Fig. 123. ^1H -NMR spectrum of compound **38**

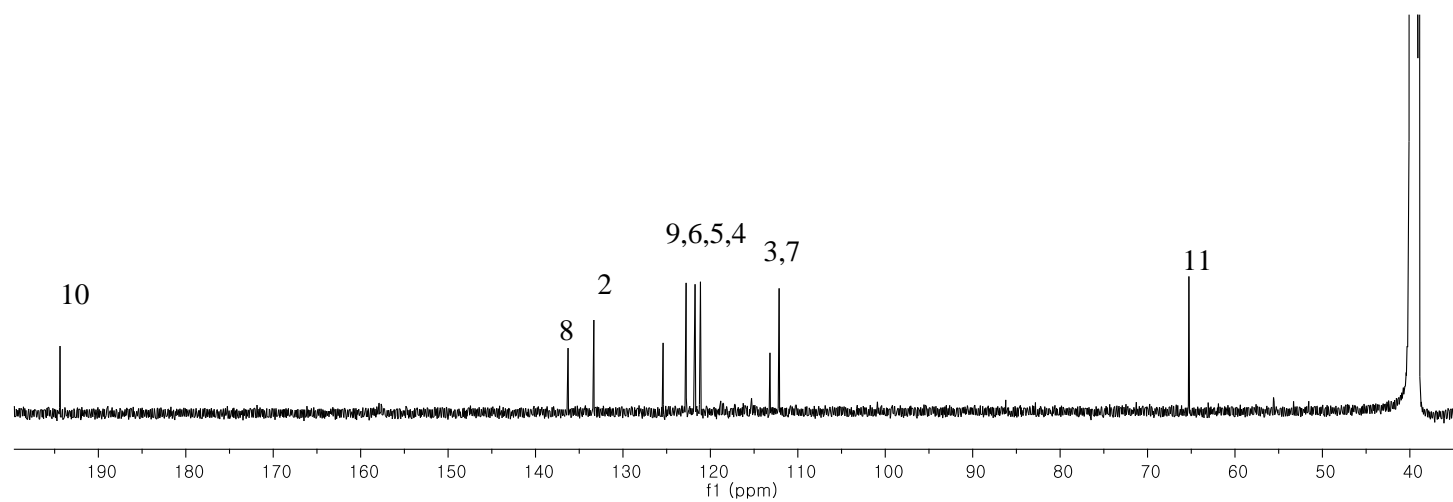
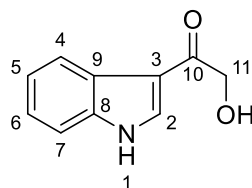


Fig. 124. ^{13}C -NMR spectrum of compound **38**

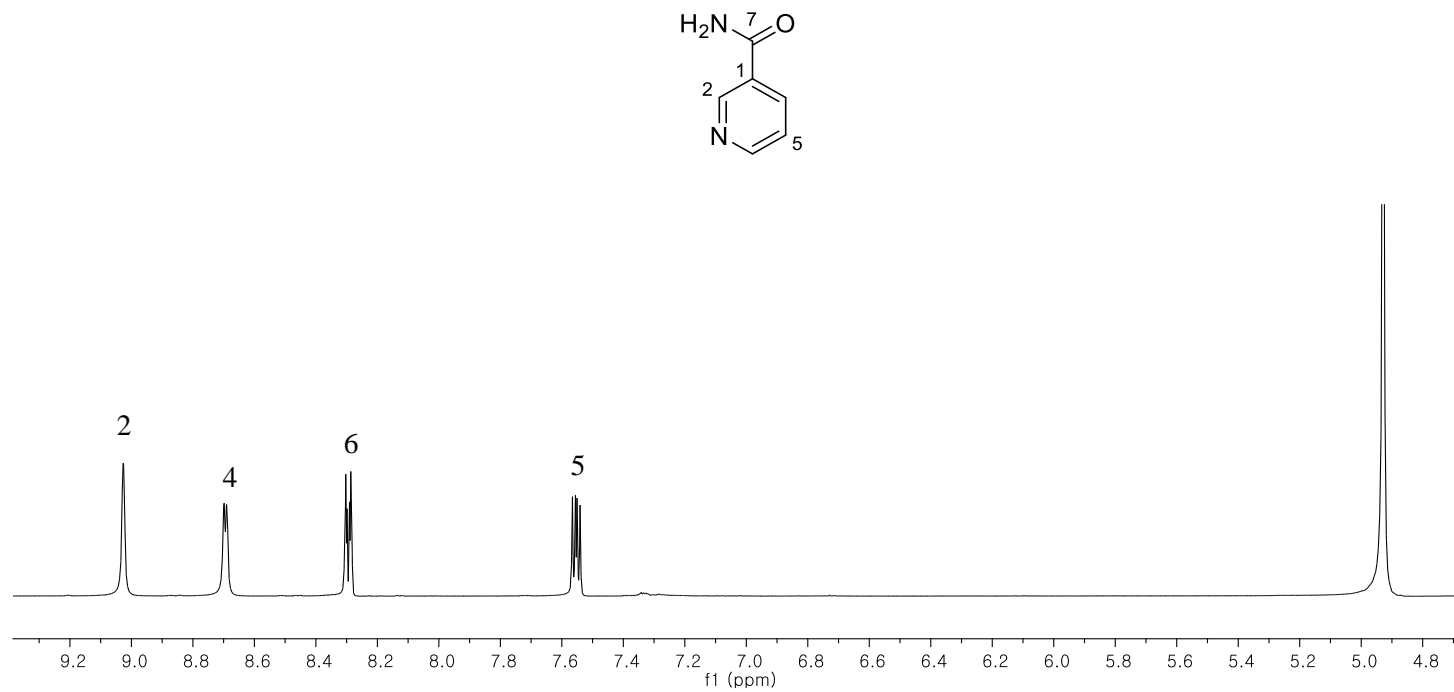


Fig. 125. ^1H -NMR spectrum of compound **41**

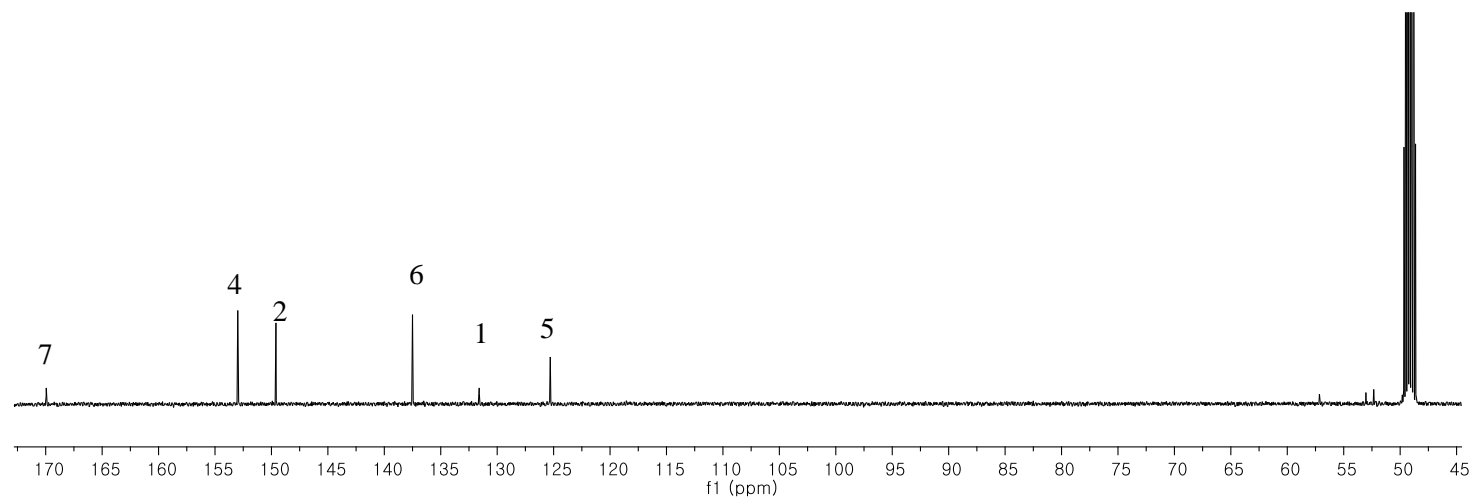
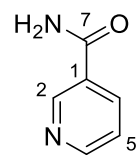


Fig. 126. ¹³C-NMR spectrum of compound **41**

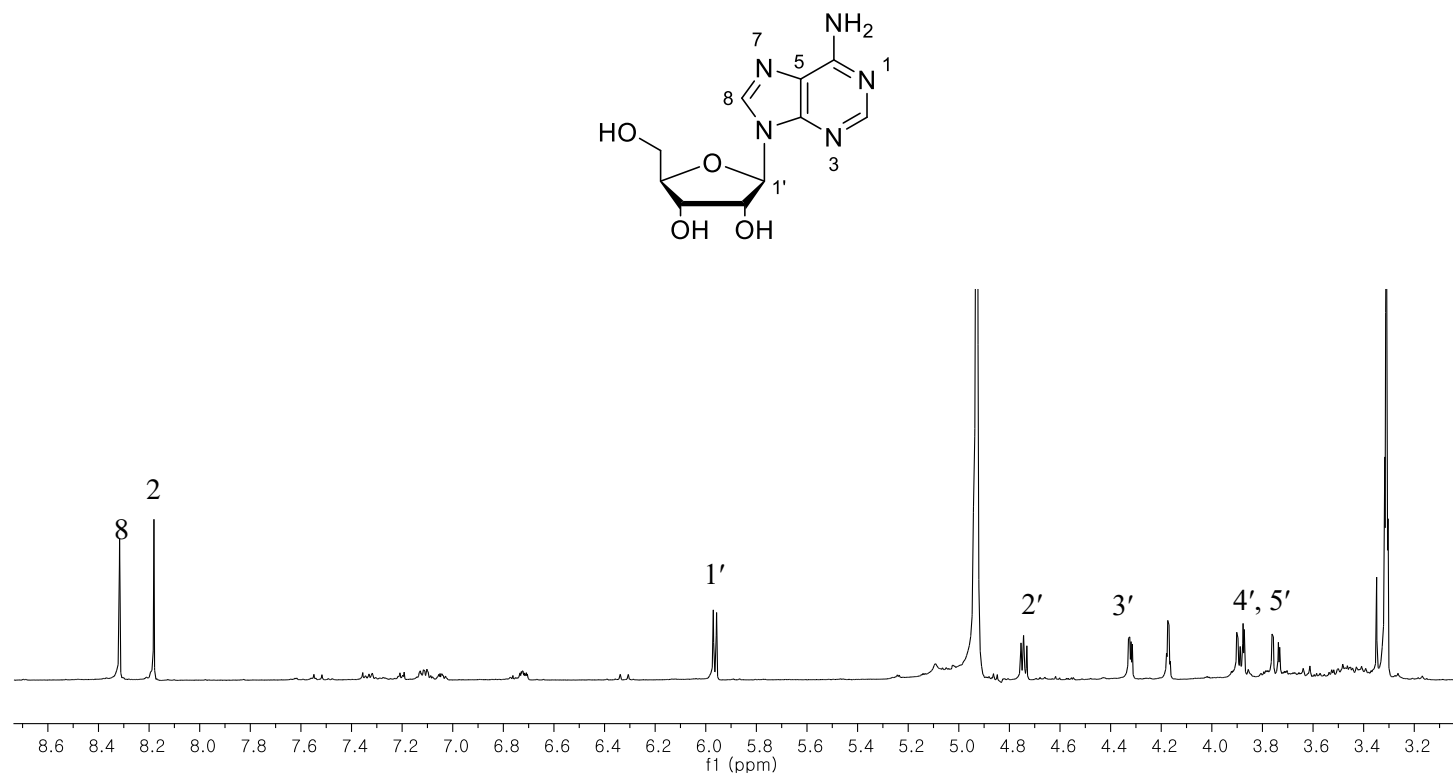


Fig. 127. ^1H -NMR spectrum of compound **42**

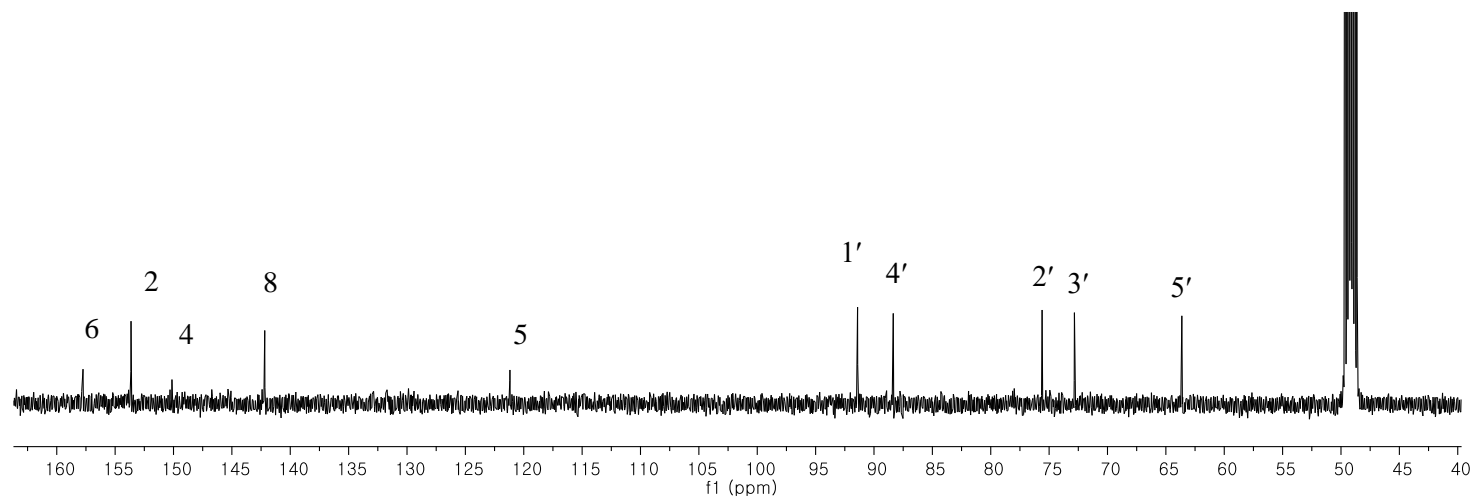
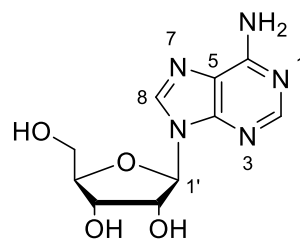


Fig. 128. ^{13}C -NMR spectrum of compound **42**

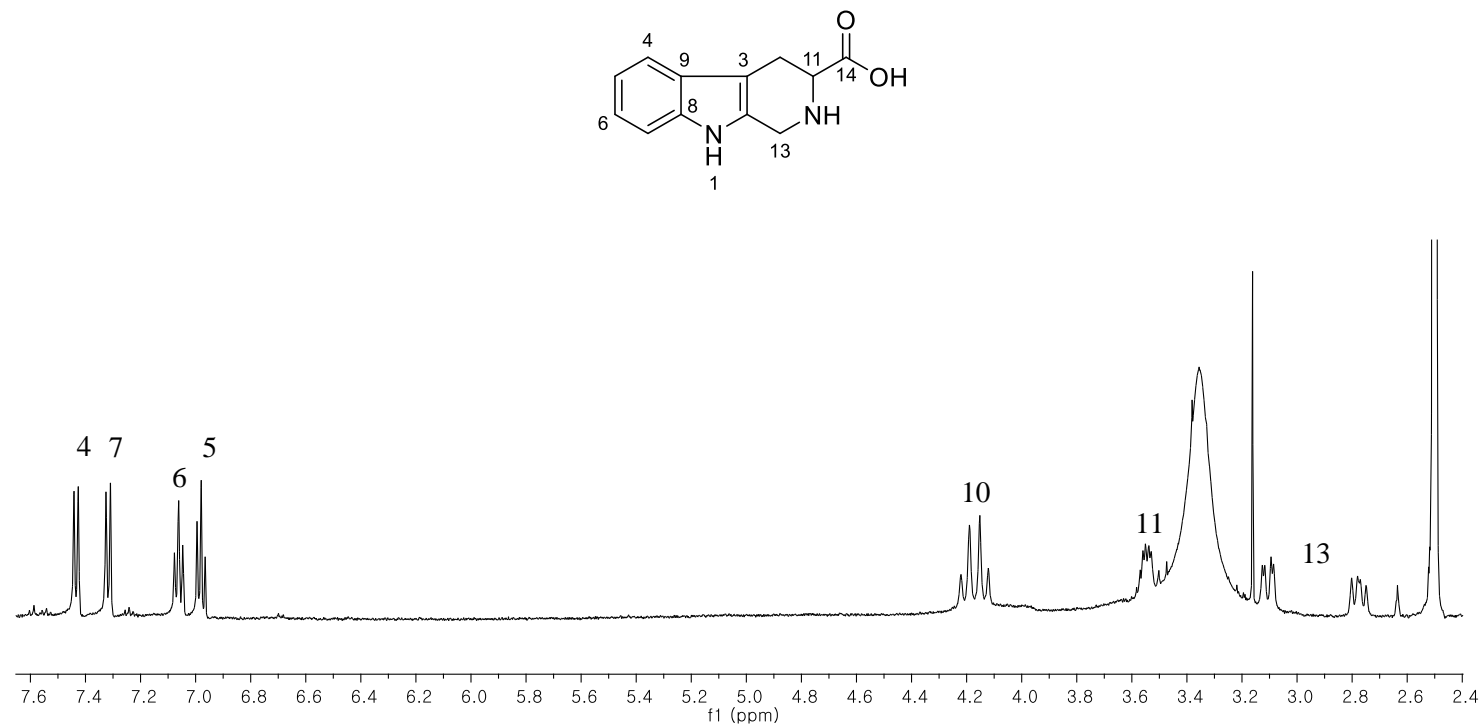


Fig. 129. ^1H -NMR spectrum of compound **46**

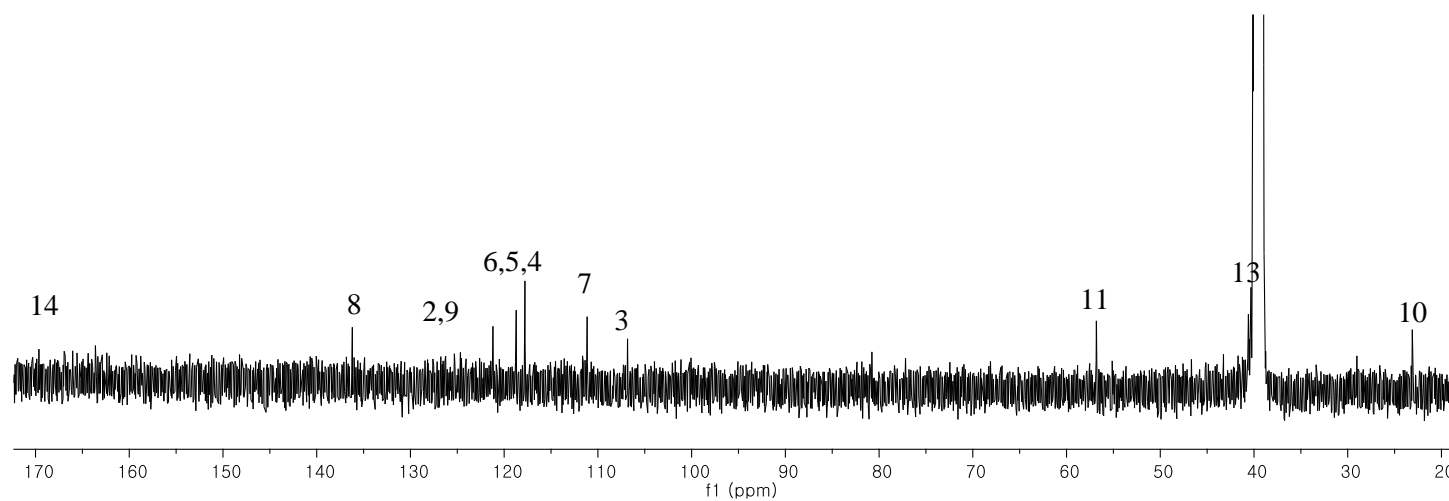
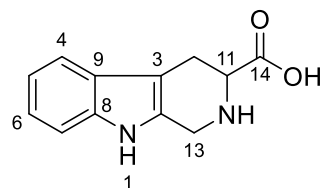


Fig. 130. ^{13}C -NMR spectrum of compound **46**

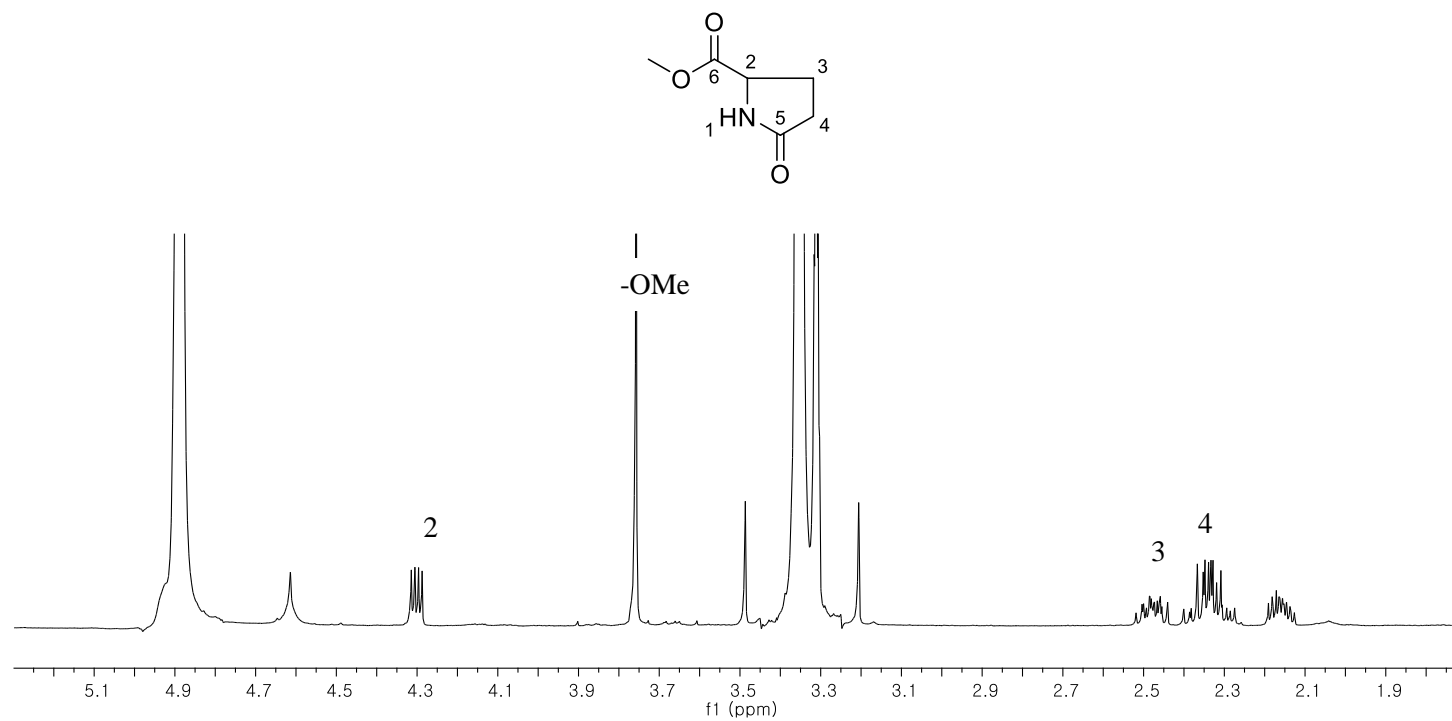


Fig. 131. ^1H -NMR spectrum of compound **47**

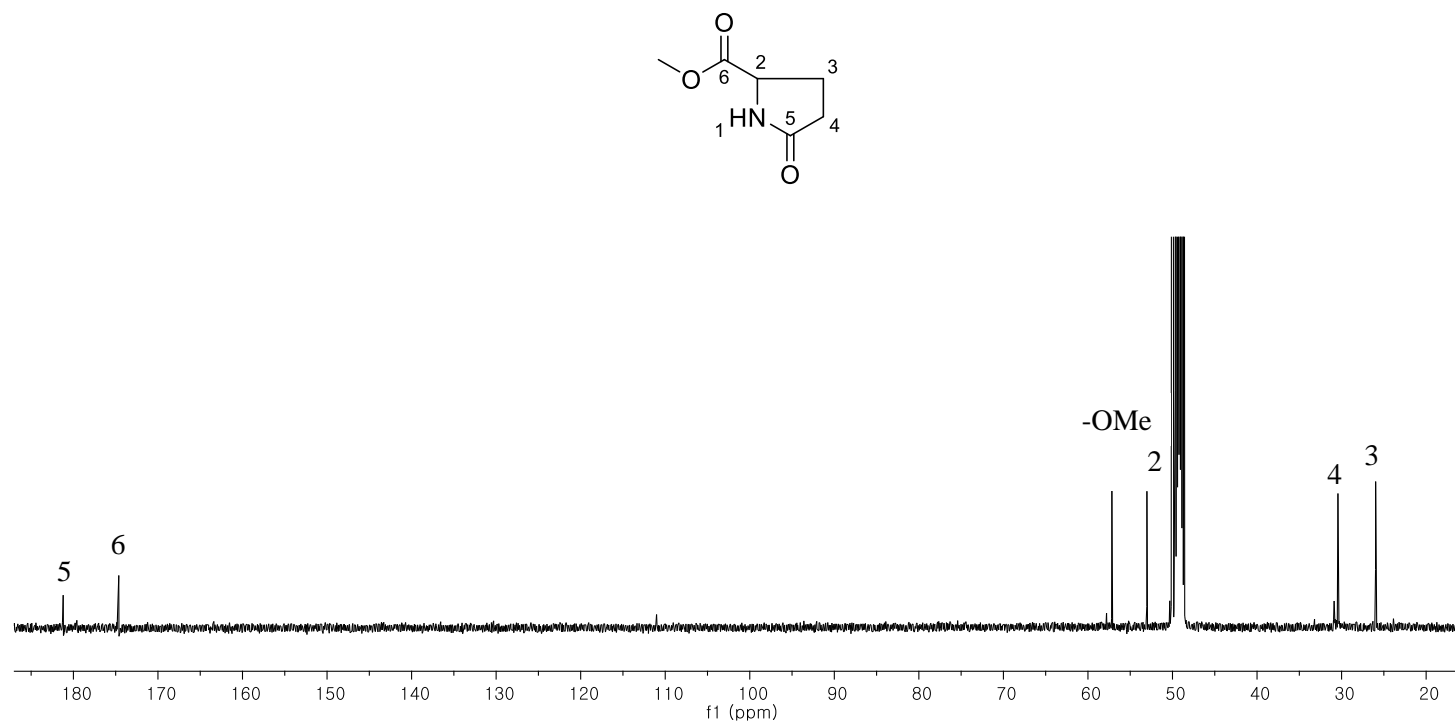


Fig. 132. ^{13}C -NMR spectrum of compound **47**

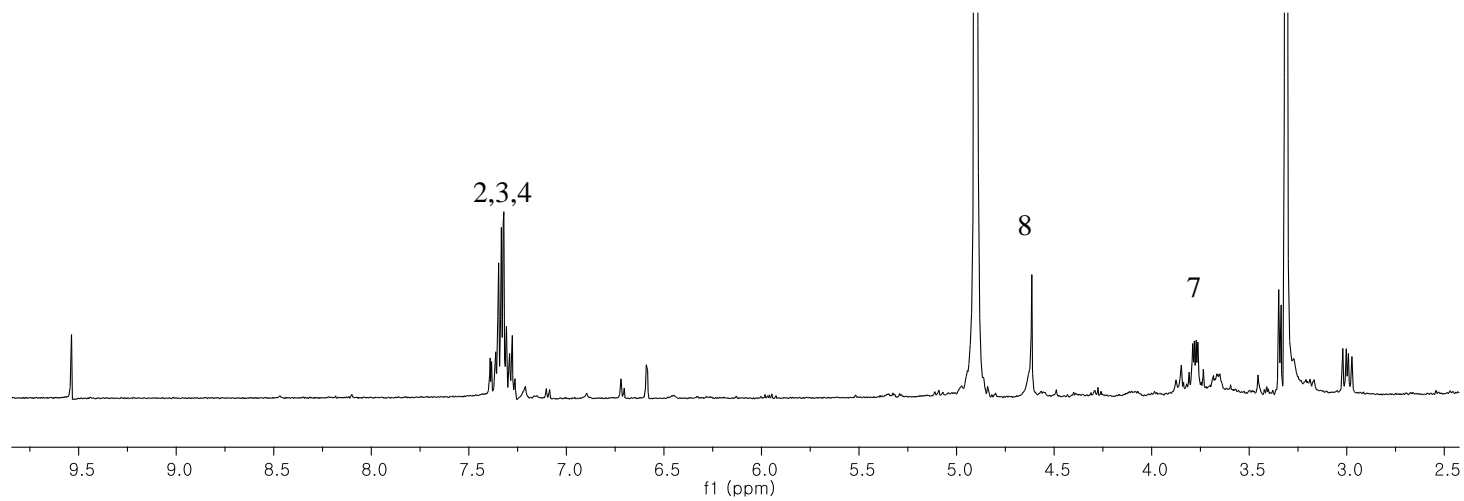
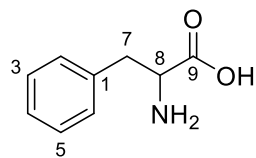


Fig. 133. ^1H -NMR spectrum of compound **49**

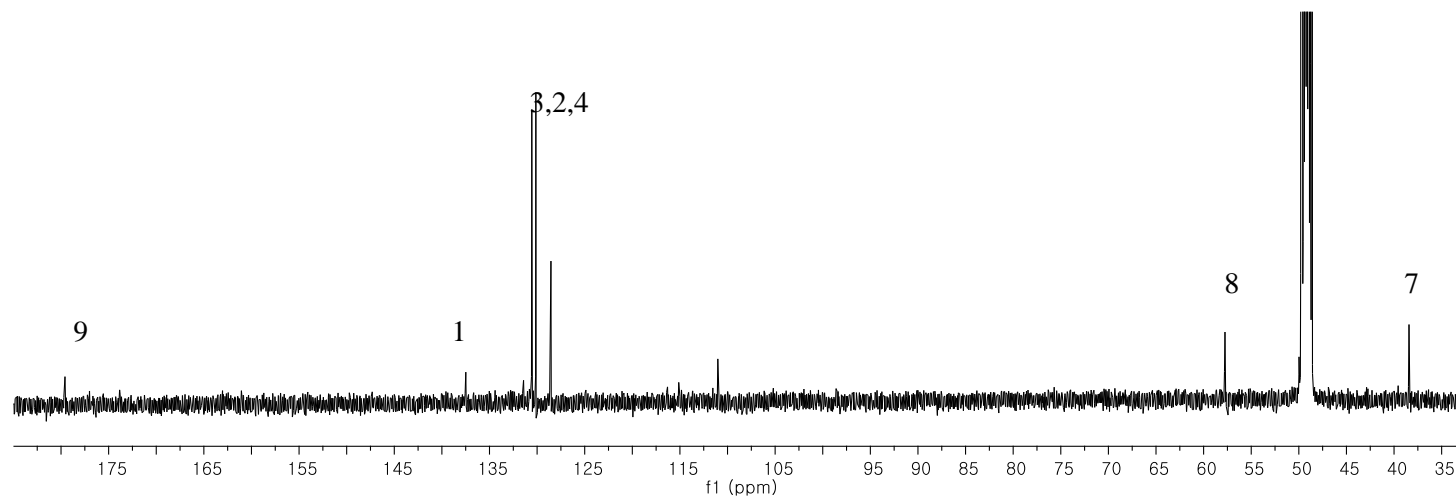
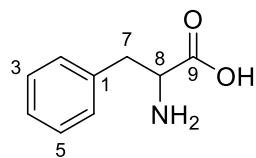


Fig. 134. ^{13}C -NMR spectrum of compound **49**

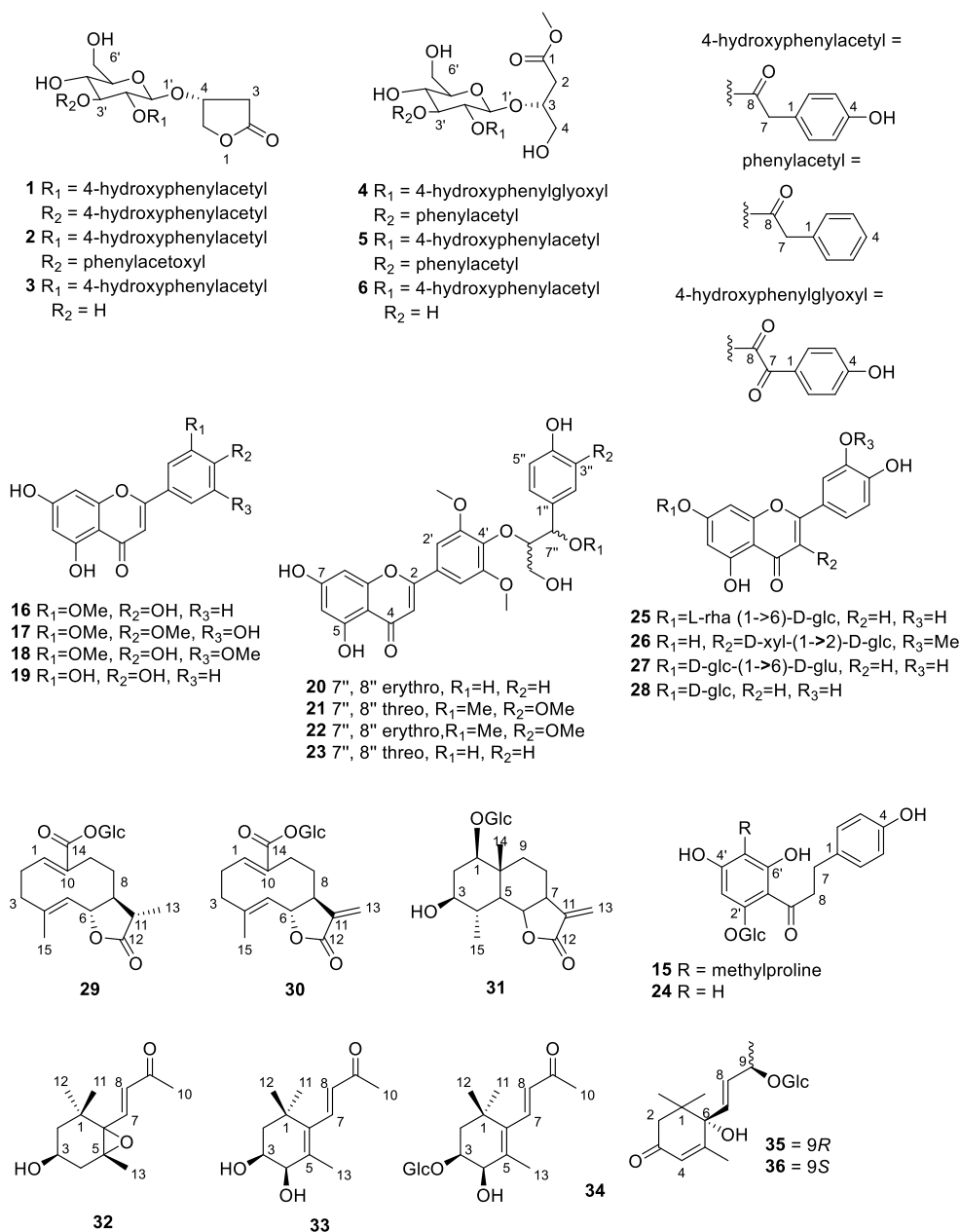


Fig. 135. Isolated compounds from *T. officinale* (continued)

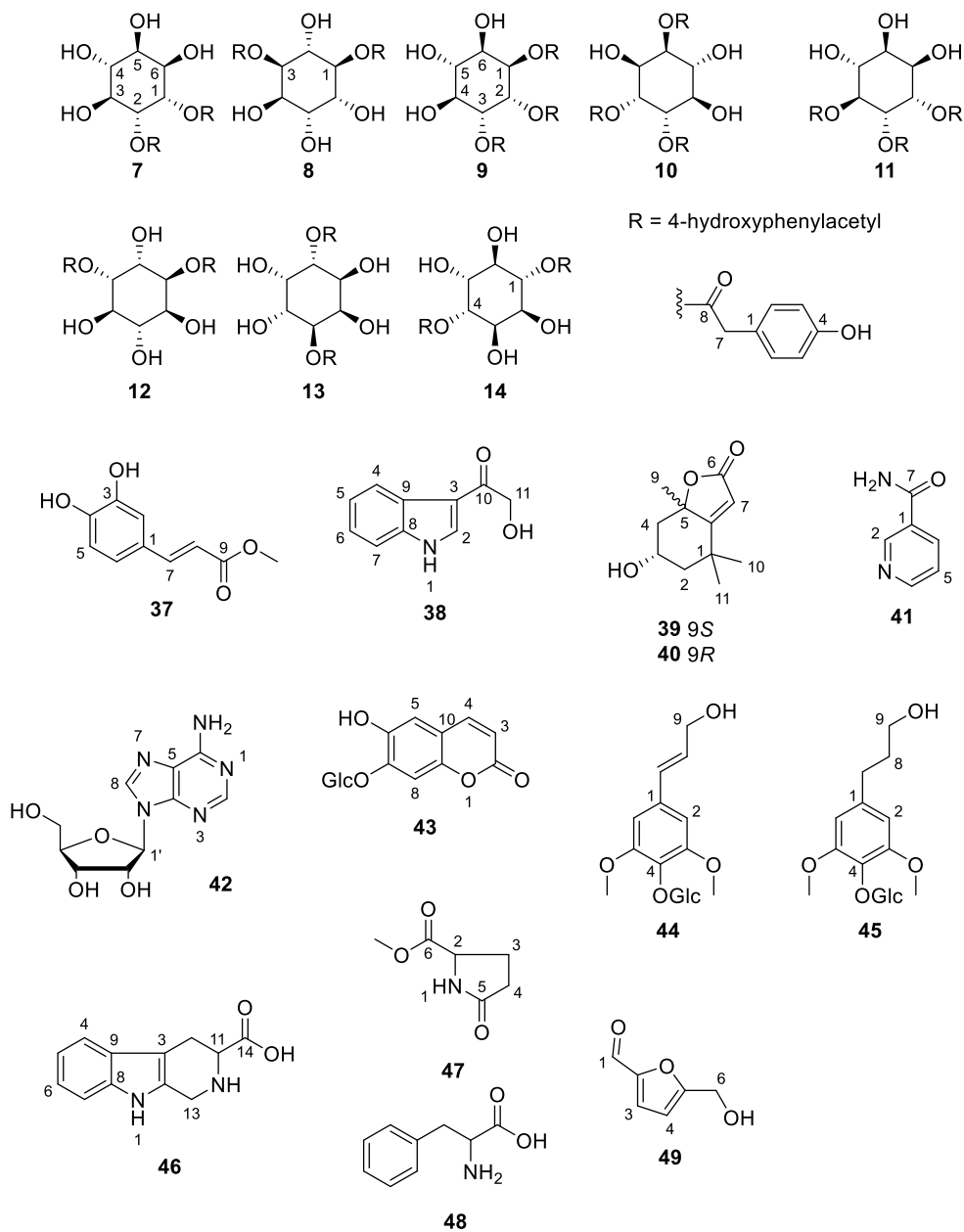


Fig. 136. Isolated compounds from *T. officinale*

2. 알파글루코시데이즈 억제활성

2.1 알파글루코시데이즈 억제활성

모든 화합물에 대하여 알파글루코시데이즈 억제 활성을 확인하였다. 그 결과 신규화합물 butyrolactone (**1** - **3**)과 butanoate (**4** - **6**) 화합물의 억제 활성 (IC_{50} 145.3 - 181.3 μ M)이 positive control인 acarbose (IC_{50} 179.9 μ M)와 유사하게 나타났다. 그리고 inositol 화합물 (**7** - **12**)의 억제활성은 acarbose 보다 우수하게 나타났는데 (IC_{50} 51.8 - 153.2 μ M), 특히 화합물 **9** - **11** 의 억제활성이 매우 우수하게 나타났다 (IC_{50} 51.8 - 61.2 μ M). Inositol 화합물의 구조를 살펴보면 두 개의 functional group을 가질 때 (**7**, **8**, **12**)는 acarbose와 유사한 정도의 활성을 보이지만, 세 개의 functional group을 가질 때 (**9** - **11**) 억제활성이 월등히 높아지는 것을 확인할 수 있다. 다만 화합물 **13**, **14**와 같이 functional group의 결합위치가 떨어져 있는 경우 거의 활성이 보이지 않았다. 화합물 **1** - **6** 의 활성도 같은 이유로 두 개의 functional group이 인접해 있을 때, 우수한 억제활성이 나타나는 것으로 보인다. 위와 같은 결과로, 화합물에 4-hydroxyphenylacetyl기와 같은 functional group과 이들의 위치가 알파글루코시데이즈 억제 활성에 영향을 미치는 것을 추측할 수 있다.

Table 21. α -Glucosidase inhibition activities of compound **1** – **49**.

Sample	Inhibition rate (%) ^a	IC50 (μ M)	Sample	Inhibition rate (%) ^a	IC50 (μ M)	Sample	Inhibition rate (%) ^a	IC50 (μ M)	Sample	Inhibition rate (%) ^a	IC50 (μ M)
1	58.3 \pm 4.6	151.9 \pm 0.6	16	56.9 \pm 2.3	155.9 \pm 3.2	31	5.4 \pm 4.6	ND ^c	46	4.5 \pm 3.1	ND ^c
2	58.9 \pm 2.9	145.3 \pm 3.6	17	57.4 \pm 2.2	154.1 \pm 2.5	32	17.6 \pm 5.0	ND ^c	47	11.1 \pm 3.1	ND ^c
3	57.6 \pm 2.9	181.3 \pm 4.3	18	59.1 \pm 1.2	161.6 \pm 2.2	33	9.1 \pm 1.4	ND ^c	48	2.7 \pm 3.1	ND ^c
4	56.6 \pm 1.6	165.1 \pm 4.5	19	99.6 \pm 6.6	39.8 \pm 4.2	34	0 \pm 1.5	ND ^c	49	4.1 \pm 2.1	ND ^c
5	59.7 \pm 4.0	149.9 \pm 0.6	20	8.7 \pm 2.7	ND ^c	35	13.7 \pm 1.5	ND ^c	Acarbose ^b	51.8 \pm 3.8	179.9 \pm 2.9
6	56.6 \pm 1.6	165.1 \pm 0.6	21	8.3 \pm 2.5	ND ^c	36	9.4 \pm 3.0	ND ^c			
7	63.7 \pm 3.9	115.2 \pm 4.3	22	9.1 \pm 1.4	ND ^c	37	1.6 \pm 1.4	ND ^c			
8	62.0 \pm 0.7	153.2 \pm 2.8	23	13.2 \pm 2.5	ND ^c	38	1.6 \pm 5.5	ND ^c			
9	85.9 \pm 3.7	56.6 \pm 4.3	24	73.9 \pm 1.5	86.7 \pm 3.1	39	8.8 \pm 2.4	ND ^c			
10	77.6 \pm 2.9	61.2 \pm 3.5	25	7.8 \pm 3.0	ND ^c	40	6.4 \pm 4.8	ND ^c			
11	78.7 \pm 1.0	51.8 \pm 6.3	26	10.3 \pm 2.6	ND ^c	41	1.8 \pm 2.7	ND ^c			
12	60.5 \pm 1.9	150.3 \pm 1.6	27	17.7 \pm 4.6	ND ^c	42	3.5 \pm 6.1	ND ^c			
13	9.3 \pm 1.5	ND ^c	28	14.4 \pm 1.5	ND ^c	43	1.8 \pm 2.7	ND ^c			
14	14.4 \pm 1.5	ND ^c	29	13.1 \pm 1.4	ND ^c	44	1.8 \pm 2.7	ND ^c			
15	61.5 \pm 4.6	151.5 \pm 4.1	30	5.1 \pm 1.5	ND ^c	45	3.6 \pm 4.1	ND ^c			

^a inhibition rate measured at 200 μ M. Data expressed as mean \pm SD of triplicate experiments.^b positive control^c not detected

2.2 알파글루코시데이즈 억제유형

억제 활성이 우수한 화합물들의 억제유형을 알아보기 위해 Lineweaver-Burk plot을 사용하였다. 화합물 **1** - **6** 중에 가장 우수한 억제활성을 보인 화합물 **2**와 flavonoid에서 가장 높은 활성을 갖는 화합물 **19**, **24** 그리고 inositol에서 우수한 억제활성을 보인 화합물 **9** - **11**에 대해 서로 다른 기질 농도로 Lineweaver-Burk plot을 그렸다. 그 결과, 화합물 **2**, **19**, **24**는 mixed-type 억제유형을 보였고 화합물 **9** - **11**은 acarbose와 같이 전형적인 경쟁적 저해 유형을 보였다 (Fig 102).

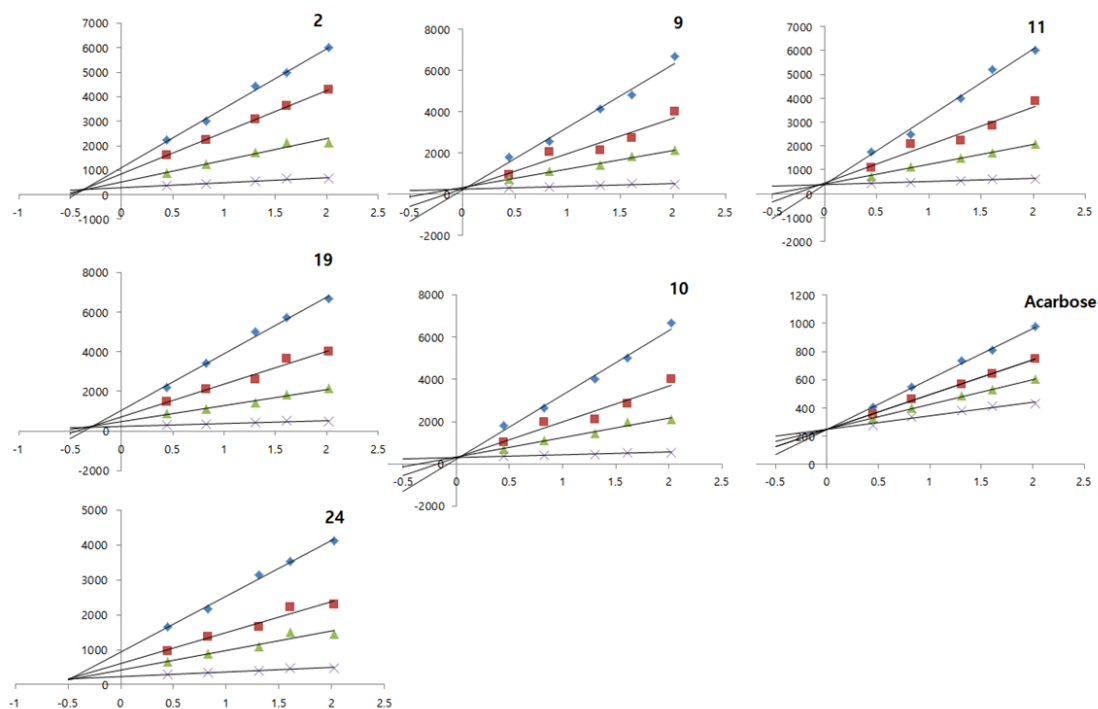


Fig.137. Lineweaver-Burk plots for the inhibition of α -glucosidase in the compound **2**, **9**, **10**, **11**, **19**, **24** and acarbose.

IV. 결론

1. 본 연구는 포공영 (*T. officinale*)에 대해 식물화학적 연구를 실시하였고 그 결과 49개의 화합물을 분리하였다.
2. 49개의 화합물은 세 개의 butyrolactone, 세 개의 butanoate, 여덟 개의 inositol, 열 네 개의 flavonoid, 세 개의 sesquiterpene, 다섯 개의 megasitgmane 그리고 열 세 개의 기타화합물들로 구성되어 있다.
3. 이 중 10개의 화합물 taraxiroside A-F (1-6), 1D-1,2-di-*O*-4-hydroxyphenylacetyl-*chiro*-inositol (7), 1D-1,3-di-*O*-4-hydroxyphenylacetyl-*chiro*-inositol (8), 1D-1,2,3-tri-*O*-4-hydroxyphenylacetyl-*chiro*-inositol (9), 5'-methylproline phloridzin (15)는 천연에서 처음 분리보고 되는 화합물이다.
4. 모든 화합물에 대하여 알파글루코시다이즈 억제활성을 확인하였고, 그 결과 화합물 9-11, 19, 24에서 우수한 억제활성을 보였다. 또한 신규화합물인 butyrolactone, butanoate 화합물들은 positive control인 acarbose와 유사한 활성을 보였다.
5. 억제반응 유형을 알아보기 위해 Lineweaver-Burk plot을 사용하였고 그 결과, butyrolactone 과 flavonoid 는 mixed-type 억제유형을 보였고 세 개의 functional group을 갖는 inositol은 경쟁적 저해유형을 보였다.

V. 참고문헌

- Akashi, T., Furuno, T., Takahashi, T., Ayabe, S.I., 1994. Biosynthesis of triterpenoids in cultured cells, and regenerated and wild plant organs of *Taraxacum officinale*. *Phytochemistry* **36**, 303–308.
- Arpadjan, S., Celik, G., Taskesen, S., Gucer, S., 2008. Arsenic, cadmium and lead in medicinal herbs and their fractionation. *Food Chem Toxicol* **46**, 2871–2875.
- Bai, N., He, K., Roller, M., Lai, C.-S., Bai, L., Pan, M.-H., 2015. Flavonolignans and other constituents from *Lepidium meyenii* with activities in anti-inflammation and human cancer cell lines. *J Agric Food Chem* **63**, 2458–2463.
- Boden, G., 1997. Role of fatty acids in the pathogenesis of insulin resistance and NIDDM. *Diabetes* **46**, 3–10.
- Borkosky, S., Valdes, D. A., Bardon, A., Diaz, J. G., Herz, W., 1996. Sesquiterpene lactones and other constituents of *Eirmocephala megaphylla* and *Cyrtocymura cincta*. *Phytochemistry* **42**, 1637–1639.
- Bussemaker, J., 1936. The cholesteretic effect of dandelion. *Naunyn-Schmiedebergs Archiv fur experimentelle Pathologie und Pharmakologie* **181**, 512–513.
- Burrows, S., Simpson, J., 1938. The triterpene alcohols of *Taraxacum* root. The triterpene group Part IV. *J Chem Soc (Part II)*, 2042–2047.
- Ceballos-Picot, I., Witko-Sarsat, V., Merad-Boudia, M., Nguyen, A.T., Thevenin, M., Jaudon, M.C., Zinggraff, J., Verger, C., Jingers, P., Descamps-Latscha, B., 1996. Glutathione antioxidant system as a marker of oxidative stress in chronic renal failure. *Free Radic Biol Med* **21**, 845–853.

- Chang, C.-L., Wang, G.-J., Zhang, L.-J., Tsai, W.-J., Chen, R.-Y., Wu, Y.-C., Kuo, Y.-H., 2010. Cardiovascular protective flavonolignans and flavonoids from *Calamus quiquesetinervius*. *Phytochemistry* **71**, 271–279.
- Chaturvedula, V. S. P., Prakash, I., 2013. Flavonoids from *Astragalus propinquus*. *J Chem Pharm Res* **5**, 261–265.
- Chen, H.-J., Inbaraj, B. S., Chen, B.-H., 2012. Determination of phenolic acids and flavonoids in *Taraxacum formosanum* Kitam by liquid chromatography-tandem mass spectrometry coupled with a post-column derivatization technique. *Int J Mol Sci* **13**, 260–285.
- Cho, S.Y., Park, J.Y., Parl, E.M., Choi, M.S., Lee, M.K., Jeon, S.M., Jang, M.K., Kim, M.J., Park, Y.B., 2002. Alternation of hepatic antioxidant enzyme activities and lipid profile in streptozotocin-induced diabetic rats by supplementation of dandelion water extract. *Clin Chim Acta* **317**, 109–117.
- Choi, J.H., Shin, K.M., Kim, N.Y., Hong, J.P., Lee, Y.S., Kim, H.J., Park, H.J., Lee, K.T., 2002. Taraxinic acid, a hydrolysate of sesquiterpene lactone glycoside from the *Taraxacum coreanum* NAKAI, induces the differentiation of human acute promyelocytic leukemia HL-60 cells. *Biol Pharm Bull* **25**, 1446–1450.
- D'Abrosca, B., DellaGreca, M., Fiorentino, A., Monaco, P., Oriano, P., Temussi, F., 2004. Structure elucidation and phytotoxicity of C₁₃ *nor*-isoprenoids from *Cestrum parqui*. *Phytochemistry* **65**, 497–505.
- Dong, Q. F., Wang, Z., Liu, H. J., Zhang, C. F., He, D. X., Wu, G., Zhang, L., 2011. Flavonoid and other compounds from *Holotrichia diomphalia* larvae. *Chem Nat Compd* **47**, 114–115.
- Du, X., Yoshizawa, T., Shoyama, Y., 1998. Butanoic acid glucoside composition of

- whole body and *in vitro* plantlets of *Anoectochilus formosanus*. *Phytochemistry* **49**, 1925–1928.
- Escandon-Rivera, S., Gonzalez-Andrade, M., Bye, R., Linares, E., Navarrete, A., Mata, R., 2015. α -Glucosidase inhibitors from *Brickellia cavanillesii*. *J Nat Prod* **75**, 968–974.
- Hagymasi, K., Blazovics, A., Lugasi, A., Kristo, SzT., Feher, J., Kery, A., 2000. In vitro antioxidant evaluation of dandelion (*Taraxacum officinale* WEB.) water extracts. *Acta Aliment* **29**, 1–7.
- Hanefeld, M., 1998. The role of acarbose in the treatment of non–insulin-dependent diabetes mellitus. *J Diabetes Complications* **12**, 228–237.
- Hagymasi, K., Blazovics, A., Lugasi, A., Kristo, SzT., Feher, J., Kery, A., 2000. The in vitro effect of dandelions antioxidants on microsomal lipid peroxidation. *Phytother Res* **14**, 43–44.
- Hansel, R., Kartarahardia, M., Huang, J.-T., Bohlmann, F., 1980. Sesquiterpenelactone- β -D-glucopyranoside sowie ein neues eudesmanolid aus *Taraxacum officinale*. *Phytochemistry* **19**, 857–861.
- Hernandez-Galicia, E., Aguilar-Contreras, A., Aguilar-Santamaria, L., Roman-Ramos, R., Chavez-Miranda, A.A., Garcia-Vega, L.M., Flores-Saenz, J.L., Alarcon-Aguilar, F.J., 2002. Studies on hyperglycemic activity of Mexican medicinal plants. In: *Proceedings of the Western Pharmacology Society*, vol. 45, pp. 118–124.
- Hfaiedh, M., Brahmi, D., Zourgui, L., 2016. Hepatoprotective effect of *Taraxacum officinale* leaf extract on sodium dichromate-induced liver injury in rats.

- Environ Toxicol **31**, 339–349.
- Hiermann, A., 1992. *Taraxacum*. In: Hansel, R., Keller, K., Rimpler, H., Schneider, G. (Eds.), *Hagers Handbuch der Pharmazeutischen Praxis*, vol. 6. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, pp. 897–904.
- Ho, C., Choi, E.J., Yoo, G.S., Kim, K.M., Ryu, S.Y., 1998. Desacetylmaticarin, an anti-allergic component from *Taraxacum platycarpum*. *Planta Med* **64**, 577–578.
- Hook, I., McGee, A., Henman, M., 1993. Evaluation of dandelion for diuretic activity and variation in potassium content. *Int. J. Pharmacogn*. **31**, 29–34.
- Hu, C., Kitts, D.D., 2004. Luteolin and luteolin 7-*O*-glucoside from dandelion flower suppress iNOS and COX-2 in RAW264.7 cells. *Mol Cell Biochem* **265**, 107–113.
- Hussain, Z., Waheed, A., Qureshi, R.A., Burdi, D.K., Verspohl, E.J., Khan, N., Hasan, M., 2004. The effect of medicinal plants of Islamabad and Muree region of Pakistan on insulin secretion from INS-1 cells. *Phytother Res* **18**, 73–77.
- Ikeda, Y., Kubo, T., Oda, E., Abe, M., Tokita, S., 2017. Incidence rate and patient characteristics of severe hypoglycemia in treated type 2 diabetes mellitus patients in Japan - retrospective DPC database analysis. *J Diabetes Investig* doi: 10.1111/jdi.12778.
- Ito, A., Kasai, R., Yamasaki, K., Sugimoto, H., 1993. Aliphatic and aromatic glucosides from *Anoectochilus koshunensis*. *Phytochemistry* **33**, 1133–1137.
- Kaltoh, H., Hussain, S., Khan, A., Saad, S.M., Khan, J.A., Khan, K.M., Perveen, S., Choudhary, M.I., 2014. Oxadiazoles and thiadiazoles: Novel α -glucosidase

- inhibitors. *Bioorg Med Chem Lett* **22**, 5454–5465.
- Kashiwada, Y., Takanaka, K., Tsukada, H., Miwa, Y., Taga, T., Tanaka S., Ikeshiro, Y., 2001. Sesquiterpene glucosides from anti-leukotriene B4 release fraction of *Taraxacum officinale*. *J Asian Nat Prod Res* **3**, 191–197.
- Kaurinovic, B., Popovic, M., Cebovic, T., Mimica-Dukic, N., 2003. Effects of *Calendula officinalis* L. and *Taraxacum officinale* WEBER (Asteraceae) extracts on the production of OH• radicals. *Fresenius Environ Bull* **12**, 250–253.
- Kenny, O., Smyth, T. J., Hewage, C. M., Brunton, N. P., McLoughlin P., 2014. 4-Hydroxyphenylacetic acid derivatives of inositol from dandelion (*Taraxacum officinale*) root characterised using LC-SPE-NMR and LC-MS techniques. *Phytochemistry* **98**, 197–203.
- Kenny, O., Smyth, T. J., Hewage, C. M., Brunton, N. P., 2015. Quantitative UPLC-MS/MS analysis of chlorogenic acid derivatives in antioxidant fractionates from dandelion (*Taraxacum officinale*) root. *Int J Food Sci Technol* **50**, 766–773.
- Kim, D.H., Jung, H.A., Sohn, H.S., Kim, J.W., Choi, J.S., 2017. Potential of icariin metabolites from *Epimedium koreanum* Nakai as antidiabetic therapeutic agents. *Molecules* **22**, 986–999.
- Kim, H.M., Lee, E.H., Shin, T.Y., Lee, K.N., Lee, J.S., 1998. *Taraxacum officinale* restores inhibition of nitric oxide production by cadmium in mouse peritoneal macrophages. *Immunopharmacol Immunotoxicol* **20**, 283–297.
- Kim, H.M., Oh, C.H., Chung, C.K., 1999. Activation of inducible nitric oxide synthase by *Taraxacum officinale* in mouse peritoneal macrophages. *Gen*

- Pharmacol **32**, 683–688.
- Kim, H.M., Shin, H.Y., Lim, K.H., Ryu, S.T., Shin, T.Y., Chae, H.J., Kim, H.R.,
Lyu, Y.S., An, N.H., Lim, K.S., 2000. *Taraxacum officinale* inhibits tumor
necrosis factor alpha production from rat astrocytes. Immunopharmacol
Immunotoxicol **22**, 519–530.
- Kisiel, W., Barszcz, B., 2000. Further sesquiterpenoids and phenolics from
Taraxacum officinale. Fitoterapia **71**, 269–273.
- Kisiel, W., Michalska, K., 2005. Sesquiterpenoids and phenolics from *Taraxacum*
hondoense. Fitoterapia **76**, 520–524.
- Ko, S.G., Koh, S.H., Jun, C.Y., Nam, C.G., Bae, H.S., Shin, M.K., 2004. Induction
of apoptosis by *Saussurea lappa* and *Pharbitis nil* on AGS gastric cancer cells.
Biol Pharm Bull **27**, 1604–1610.
- Koo, H.N., Hong, S.H., Song, B.K., Kim, C.H., Yoo, Y.H., Kim, H.M., 2004.
Taraxacum officinale induces cytotoxicity through TNF- α and IL-1 α secretion
in Hep G2 cells. Life Sci **74**, 1149–1157.
- Krentz, A.J. and Bailey, C.J., 2005. Oral antidiabetic agents; Current role in type 2
diabetes mellitus. Drugs **65**, 385–411.
- Lee, S. Y., Moon, E., Kim, S. Y., Lee, K. R., 2013. Quinic acid derivatives from
Pimpinella brachycarpa exert anti-neuroinflammatory activity in
lipopolysaccharide-induced microglia. Bioorg Med Chem Lett **23**, 2140–2144.
- Leung, A.Y., Foster, S., 1996. Dandelion root. In: Encyclopedia of Common
Natural Ingredients Used in Food, Drugs and Cosmetics, second ed. John
Wiley & Sons, New York, pp. 205–207.
- Leu, Y.-L., Shi L.-S., Damu A.G., 2003. Chemical Constituents of *Taraxacum*

- formosanum*. Chem Pharm Bull **51**, 599–601.
- Li, J., Li, X., Xu, W., Wang, S., Hu, Z., Zhang, Q., Deng, X., Wang, J., Zhang, J., Guo, C., 2015. Antifibrotic effects of luteolin on hepatic stellate cells and liver fibrosis by targeting AKT/mTOR/p70S6K and TGF β /Smad signalling pathways. Liver Int **35**, 1222–1233.
- Liu, J., Zhang N., Liu, M., 2014. A new inositol triester from *Taraxacum mongolicum*. Nat Prod Res **28**, 420–423.
- Liu, G., Yang, G., Fang, T., Cai, Y., Wu, C., Wang, J., Huang, Z., Chen, X., 2014. NMR-based metabolomic studies reveal changes in biochemical profile of urine and plasma from rats fed with sweet potato fiber or sweet potato residue. RSC Adv **4**, 23749–23758.
- Michalska, K., Marciniuk, J., Kisiel, W., 2010. Sesquiterpenoids and phenolics from roots of *Taraxacum udum*. Fitoterapia **81**, 434–436.
- Petlevski, R., Hadzija, M., Slijepcevic, M., Juretic, D., 2001. Effect of ‘antidiabetis’ herbal preparation on serum glucose and fructosamine in NOD mice. J Ethnopharmacol **75**, 181–184.
- Petlevski, R., Hadzija, M., Slijepcevic, M., Juretic, D., 2003. Glutathione S-transferases and malondialdehyde in the liver of NOD mice on short-term treatment with plant mixture extract P-9801091. Phytother Res **17**, 311–314.
- Pirtkien, R., Surke, E., Seybold, G., 1960. Vergleichende Untersuchungen uber die choleretische Wirkung verschiedener Arzneimittel bei der Ratte. Die medizinische Welt **26**, 1417–1422.
- Podeschwa, M., Plettenburg, O., vom Brocke, J., Block, O., Adelt, S., Altenbach,

- H.J., 2003. Stereoselective synthesis of *myo*-, *neo*-, *L-chiro*, *D-chiro*, *allo*-, *scyllo*-, and *epi*-inositol systems via conduritols prepared from *p*-benzoquinone. *Eur J Org Chem* **2003**, 1958–1972.
- Racz-Kotilla, E., Rácz, G., Solomon, A., 1974. The action of *Taraxacum officinale* extracts on the body weight and diuresis of laboratory animals. *Planta Med* **26**, 212–217
- Ribeiro, D., Freitas, M., Tomé, S. M., Silva, A. M. S., Porto, G., Fernandes, E., 2013. Modulation of human neutrophils' oxidative burst by flavonoids. *Eur J Med Chem* **67**, 280–292.
- Ripsin, C.M., Kang, H., Urban, R.J., 2009. Management of Blood Glucose in Type 2 Diabetes Mellitus. *Am Fam Physician* **79**, 29-36.
- Rofi R.D., Pomilio, A. B., 1985. 5,7,3'-trihydroxy-4',5'-dimethoxyflavone and other phenolics from *Poa Huecu*. *Phytochemistry* **24**, 2131–2132.
- Satoh, T., Igarashi, M., Yamada, S., Takahashi, N., Watanabe, K., 2015. Inhibitory effect of black tea and its combination with acarbose on small intestinal α -glucosidase activity. *J Ethnopharmacol* **161**, 147–155.
- Schutz, K., Carle, R., Schieber, A., 2006. *Taraxacum*-A review on its phytochemical and pharmacological profile. *J Ethnopharmacol.* 107, 313–323.
- Seco, J.M., Quinoa, E., Riguera, R., 2004. The assignment of absolute configuration by NMR. *Chem Rev* **104**, 17–117.
- Seo, S.W., Koo, H.N., An, H.J., Kwon, K.B., Lim, B.C., Seo, E.A., Ryu, D.G., Moon, G., Kim, H.Y., Kim, H.M., Hong, S.H., 2005. *Taraxacum officinale* protects against cholecystokinin-induced acute pancreatitis in rats. *World J*

Gastroenterol **11**, 597–599.

- Shi, S., Zhang, Y., Zhao, Y., Huang, K., 2008a. Preparative isolation and purification of three flavonoid glycosides from *Taraxacum mongolicum* by high-speed counter-current chromatography. J Sep Sci **31**, 683–688.
- Shi, S., Zhao, Y., Zhou, H., Zhang, Y., Jiang, X., Huang, K., 2008b. Identification of antioxidants from *Taraxacum mongolicum* by high-performance liquid chromatography-diode array detection-radical-scavenging detection-electrospray ionization mass spectrometry and nuclear magnetic resonance experiments. J Chromatogr A **1209**, 145–152.
- Shi, S., Zhou, H., Zhang, Y., Zhao, Y., Huang, K., Liu, S., 2009. A high-speed counter-current chromatography-HPLC-DAD method for preparative isolation and purification of two polymethoxylated flavones from *Taraxacum mongolicum*. J Chromatogr Sci **47**, 349–353.
- Sweeny, B., Vora, M., Ulbricht, C., Basch, E., 2005. Evidence-based systematic review of dandelion (*Taraxacum officinale*) by natural standard research collaboration. J Herb Pharmacother **5**, 79–93.
- Tanaka, T., Nakashima, T., Ueda, T., Tomii, K., Kouno, I., 2007. Facile discrimination of aldose enantiomers by reversed-phase HPLC. Chem Pharm Bull **55**, 899–901.
- Takahashi, H., Kittaka, H., Ikegami, S., 2001. Novel synthesis of enantiomerically pure natural Inositols and their diastereoisomers. J Org Chem. **66**, 2705–2716.
- Turner, A., Chen, S.-N., Joiike, M. K., Pendland, S. L., Pauli, G. F., Farnsworth, N. R., 2005. Inhibition of Uropathogenic Escherichia coli by cranberry juice: a

- new antiadherence assay. *J Agric Food Chem* **53**, 8940–8947.
- Ullrich, S.F., Averagesch, N.J.H., Castellanos, L., Choi, Y.H., Rothauer, A., Kayser, O., 2016. Discrimination of wild types and hybrids of *Duboisia myoporoides* and *Duboisia leichhardtii* at different growth stages using ¹H NMR-based metabolite profiling and tropane alkaloids-targeted HPLC-MS analysis. *Phytochemistry* **131**, 44–56.
- van de Laar, .F.A., Lucassen, P.L., Akkermans, R.P., van de Lisdonk, E.H., Rutten, G.E., van Weel, C., 2005. α -Glucosidase inhibitors for patients with type 2 diabetes. *Diabetes care* **28**, 154–163.
- Vichayanrat, A., Ploybutr, S., Tunlakit, M., Watanakejorn, P., 2002. Efficacy and safety of voglibose in comparison with acarbose in type 2 diabetic patients. *Diabetes Res Clin Pract* **55**, 99–103.
- Vuckovic, I., Rapinoja, M.L., Vaismaa, M., Vannien, P., Koskelab, H., 2016. Application of comprehensive NMR-based analysis strategy in annotation, isolation and structure elucidation of low molecular weight metabolites of *Ricinus communis* seeds. *Phytochem Anal* **27**, 64–72.
- Wang, P., Kong, F., Wei, J., Wang, Y., Wang, W., Hong, K., Zhu, W., 2014. Alkaloids from the mangrove-derived actinomycete *Jishengella endophytica* 161111. *Mar Drugs* **12**, 477–490.
- Warashina, T., Umehara, K., Miyase, T., 2012. Constituents from the roots of *Taraxacum platycarpum* and their effect on proliferation of human skin fibroblasts. *Chem Pharm Bull* **60**, 205–212.
- Weiss, R.F., Fintelmann, V., 2000. *Taraxacum officinale*, Dandelion. In: *Herbal*

- Medicine, second ed. revised and expanded. Thieme, Stuttgart, New York, pp. 123–125, 244–246.
- Williams, C.A., Goldstone, F., Greenham, J., 1996. Flavonoids, cinnamic acids and coumarins from the different tissues and medicinal preparations of *Taraxacum officinale*. *Phytochemistry* **42**, 121–127.
- Wirngo, F.E., Lambert, M.N., Jeppsen, P.B., 2016. The physiological effects of dandelion (*Taraxacum officinale*) in type 2 diabetes. *Rev Diabet Stud* **13**, 113–131.
- Wolbis, M., Krolikowska, M., Bednarek, P., 1993. Polyphenolic compounds in *Taraxacum officinale*. *Acta Pol Pharm -Drug Res* **50**, 153–158
- Xie, H., Wang, T., Matsuda, H., Morikawa, T., Yoshikawa, M., Tani, T., 2005. Bioactive constituents from Chinese natural medicines. Inhibitory effect on aldose reductase and structures of Saussureosides A and B from *Saussurea medusa*. *Chem Pharm Bull* **53**, 1416–1422.
- Yan, Z.-H., Han, Z.-Z., Hu, X.-Q., Liu, Q.-X., Zhang, W.-D., Liu, R.-H., Li, H.-L., 2013. Chemical constituents of *Euonymus alatus*. *Chem Nat Compd* **49**, 340–342.
- Yang, H., Jeong, E. J., Kim, J., Sung, S. H., Kim, Y. C., 2011. Antiproliferative Triterpenes from the Leaves and Twigs of *Juglans sinensis* on HSC-T6 Cells. *J. Nat. Prod.* **74**, 751–756.
- Yasukawa, K., Akihisa, T., Inoue, Y., Tamura, T., Yamanouchi, S., Takido, M., 1998. Inhibitory effect of the methanol extracts from Compositae plants on 12-*O*-tetradecanoylphorbol-13-acetate-induced ear oedema in mice. *Phytother. Res.* **12**, 484–487.

- Yun, S.O., Cho, H.R., Choi, H.S., 2002. Anticoagulant from *Taraxacum platycarpum*. *Biosci. Biotechnol. Biochem.* **66**, 1859–1864.
- Zhang, Y., Gao, H., Liu, R., Liu, J., Chen, L., Li, X., Zhao, L., Wang, W., Li, B., 2017. Quinazoline-1-deoxynojirimycin hybrids as high active dual inhibitors of EGFR and α -glucosidase. *Bioorg Med Chem Lett.* **27**, 4309–4313.
- Zhang, Y., Xia, Y., Lai, Y., Tang, F., Luo, Z., Xue, Y., Yao, G., Zhang, Y., Zhang, J., 2014. Efficient synthesis of kinsenoside and goodyeroside A by a chemo-enzymatic approach. *Molecules* **19**, 16950–16958.
- Zidorn, C., Ellmerer-Muller, E. P., Stuppner, H., 1999. Eudesmanolides and inositol derivatives from *Taraxacum linearisquameum*. *Phytochemistry* **51**, 991–994.

국문초록

당뇨는 현대인의 심각한 질병 중 하나이며, 만성 대사성 질환이다. 당 대사가 제대로 진행되지 않아 고혈당을 유발하고 이는 결국 많은 장기의 손상을 초래한다. 당뇨병은 두 가지 형태로 나뉘는데 인슐린 부족으로 인한 1형 당뇨와 비인슐린 의존성인 2형 당뇨로 나뉜다. 이중 2형 당뇨의 경우, 전체 당뇨병환자의 약 90%를 차지한다. 2형 당뇨의 치료법 중에 알파글루코시데이즈를 억제하는 방법이 있다. 이는 탄수화물을 소장에서 분해하여 흡수하는 것을 억제함으로써 결과적으로 혈당을 낮추는 것이다. 현재 사용되는 알파글루코시데이즈 억제제는 acarbose나 voglibose 등이 있다. 하지만 이들은 모두 설사와 같은 위장장애를 유발하는 부작용이 있다.

포공영은 다년생 국화과 (Compositae) 식물로, 기원식물로는 주로 민들레 (*Taraxacum platycarpum*)과 서양민들레 (*T. officinale*)가 있다. 민들레속 식물은 전세계에 널리 분포되어 있는데 특히 서양민들레의 경우 과거 유럽지역에 자생하던 식물이지만 현재는 동아시아 쪽에도 많이 분포되고 있다. 민들레의 전체부분은 예로부터 야채나 약재로 사용되어 왔는데 황달, 이담, 이뇨, 항당뇨, 항염증 등의 용도로 많이 사용하였다. 이를 토대로 많은 생리활성 연구와 식물화학적 연구가 진행, 보고 되었다. 특히 당뇨병과 관련된 연구로 phytosterols, sesquiterpene lactones, flavonoids 과 phenolic acids 등이 항당뇨활성과 관련된 화합물이

라는 것이 보고되어 있다. 이에 본 연구는 서양민들레에 대해 식물화학적 연구를 진행하였고, 이들의 알파글루코시데이즈 억제활성을 확인하였다.

민들레 전체를 메탄올로 추출하여, 추출물을 극성별로 *n*-Hexane, CHCl₃, EtOAc, *n*-BuOH 및 물 분획물로 나누고 CHCl₃, EtOAc, *n*-BuOH 세 분획물에 대하여 여러 크로마토그래피법을 사용하여 분리를 실시하였다. 그 결과, 3종의 butyrolactones (**1-3**), 3종의 butanoates (**4-6**), 8종의 inositols (**7-14**), 14종의 flavonoids (**15-28**), 3종의 sesquiterpenes (**29-31**), 5종의 megastigmanes (**32-36**) 그리고 10종의 기타화합물들(**37-49**)을 분리하였다. 분리된 49종의 화합물을 이들의 성상 및 각종 분광학적 방법을 통해 그 구조를 taraxiroside A-E (**1-6**), 1D-1,2-di-*O*-4-hydroxyphenylacetyl-*chiro*-inositol (**7**), 1D-1,3-di-*O*-4-hydroxyphenylacetyl-*chiro*-inositol (**8**), 1D-1,2,3-tri-*O*-4-hydroxyphenylacetyl-*chiro*-inositol (**9**), 1,2,5-tri-*O*-4-hydroxyphenyl acetyl-*L*-*chiro*-inositol (**10**), 1D-4,5,6-tri-*O*-4-hydroxyphenylacetyl-*chiro*-inositol (**11**), 1D-1,5-di-*O*-4-hydroxyphenylacetyl-*chiro*-inositol (**12**), 1,4-di-*O*-4-hydroxyphenylacetyl-*neo*-inositol (**13**), 1D-1,4-di-*O*-4-hydroxyphenylacetyl-*chiro*-inositol (**14**), phloridzin-5'-methylproline (**15**), chrysoeriol (**16**), 5,7,3'-hydroxy-4',5'-dimethoxy flavone (**17**), 5,7,4'-hydroxy-3',5'-dimethoxy flavone (**18**), luteolin (**19**), calquiquelignan D (**20**), tricin 4'-*O*-[threo- β -guaiacyl-(7''-*O*-methyl)-glyceryl] ether (**21**), tricin 4'-*O*-[erythro- β -guaiacyl-(7''-*O*-methyl)-glyceryl] ether (**22**), calquiquelignan E (**23**), phloridzin (**24**), luteolin-7-*O*-rutinoside (**25**), isorhamnetin 3-*O*- α -D-xylopyranosyl-(1 \rightarrow 2)- β -D-glucopyranoside (**26**), luteolin-7-*O*- β -D-

glucopyranosyl-(1'''→6'')-O-β-D-glucopyranoside (27), luteolin-7-O-β-D-glucopyranoside (28), 11β,13-dihydrotaraxinic acid 1'-O-β-D-glucopyranoside (29), taraxinic acid 1'-O-β-D-glucopyranoside (30), 3β-hydroxy-4αH-3-dihydrosantamarine-β-D-glucopyranoside (31), annuionone D (32), 3,4-dihydroxy-5,7-megastigmadien-9-one (33), komaroveside A (34), 6S,9R-roseoside (35), 6S,9S-roseoside (36), methyl 3,4-dihydroxycinnamate (37), 3-glycerindole (38), loliolide (39), epilololide (40), nicotinamide (41), adenosine (42), aesculetin-7-O-β-D-glucopyranoside (43), syringin (44), dihydrosyringin (45), lycoperodine-1 (46), methyl (S)-pyroglutamate (47), 5-(hydroxymethyl)furfural (48), phenylalanine (49) 으로 동정하였으며, 이중 화합물 1-9, 15 은 천연에서 처음으로 분리보고 되는 물질이다.

분리한 49종의 화합물에 대하여 알파글루코시데이즈 억제활성을 확인한 결과, 화합물 1-12, 15-19, 24 가 positive control인 acarbose (IC₅₀ 179.9 μM) 와 유사한 활성을 나타냈으며, 특히 화합물 9-11, 19, 24 는 더욱 우수한 억제활성을 보였다 (IC₅₀ 39.8- 86.7 μM). 이들의 억제 유형을 알아보기 위해 Lineweaver-Burk plot을 사용하였고 화합물 2, 19, 24 는 mixed-type 억제였으며 화합물 9-11은 acarbose와 같이 경쟁적 저해를 하였다.

주요어: 포공영, *Taraxacum officinale*, butyrolactone, butanoate, inositol, 알파글루코시데이즈 억제

학번: 2011-30510

부록

Supplementary information

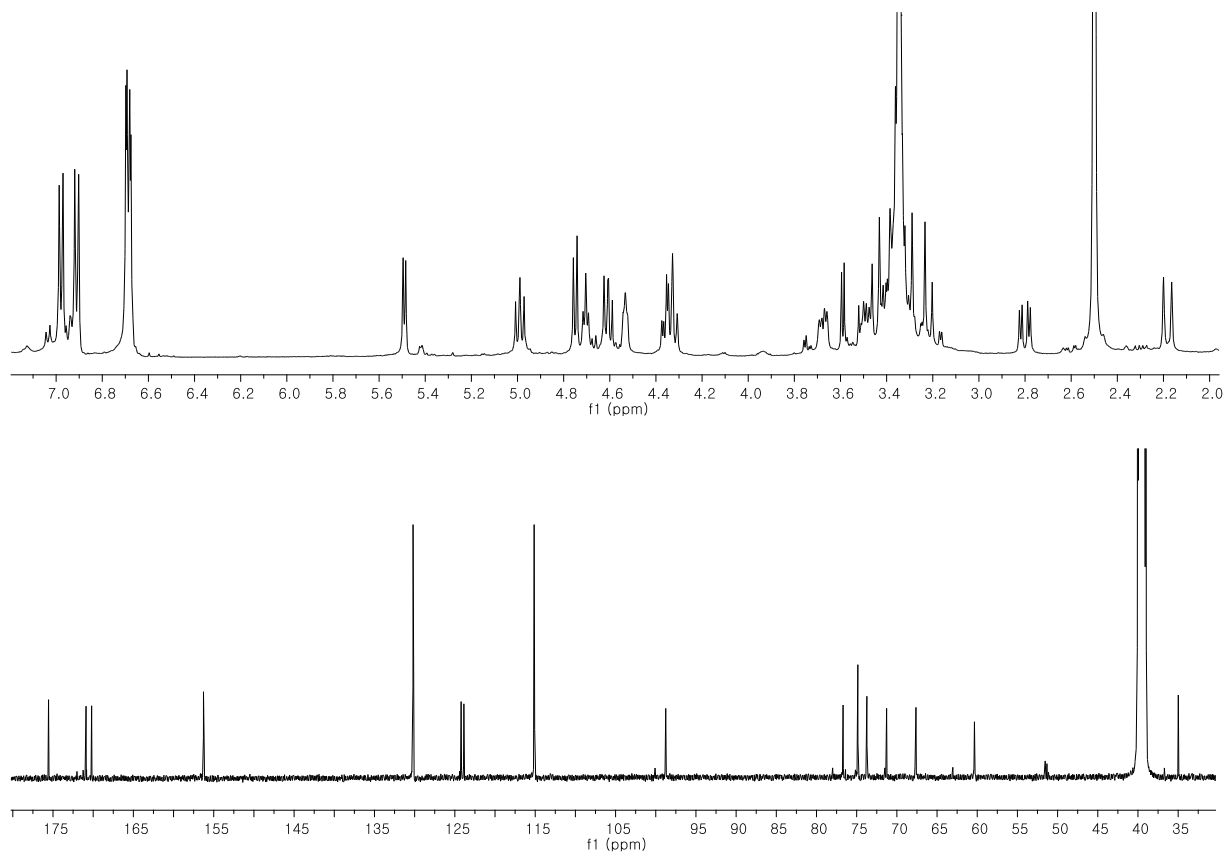


Fig. S1. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **1**

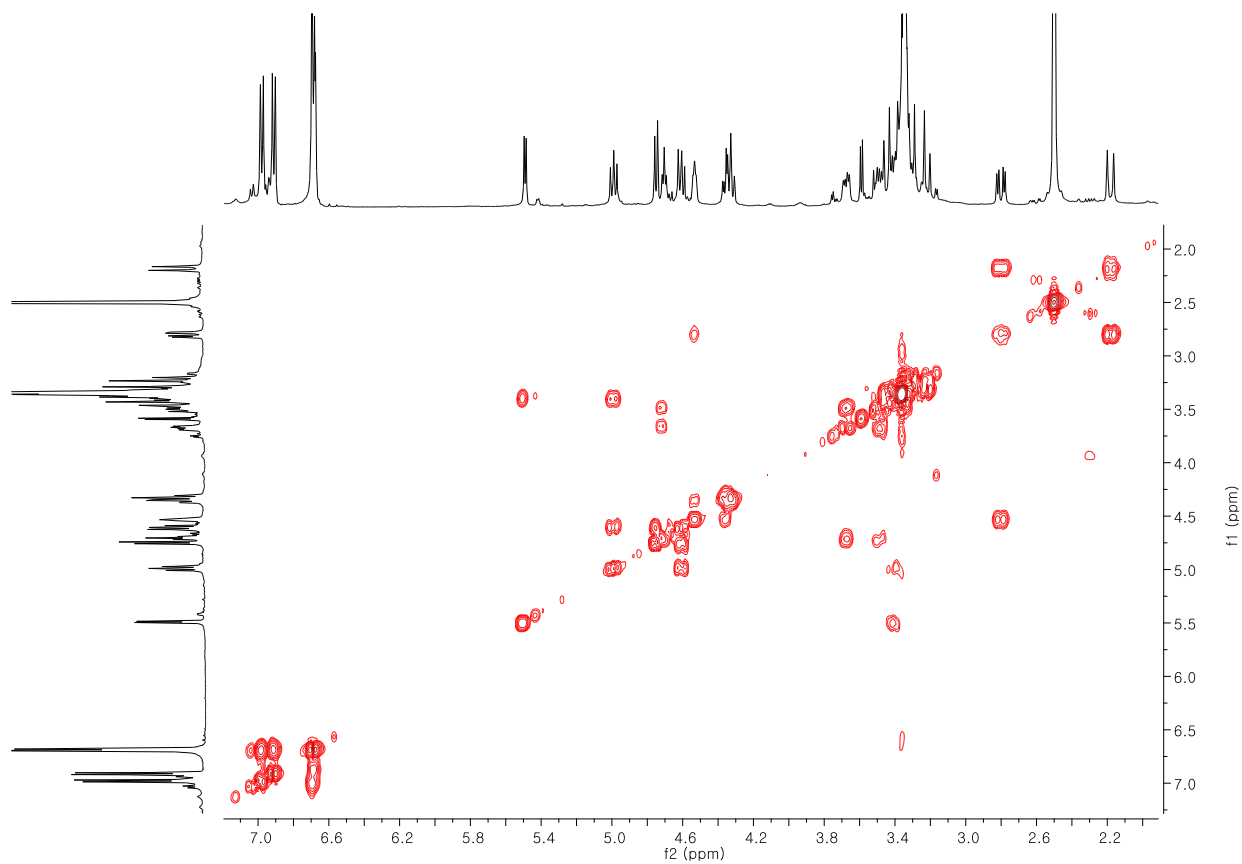


Fig. S2. ^1H - ^1H COSY spectrum of compound **1**

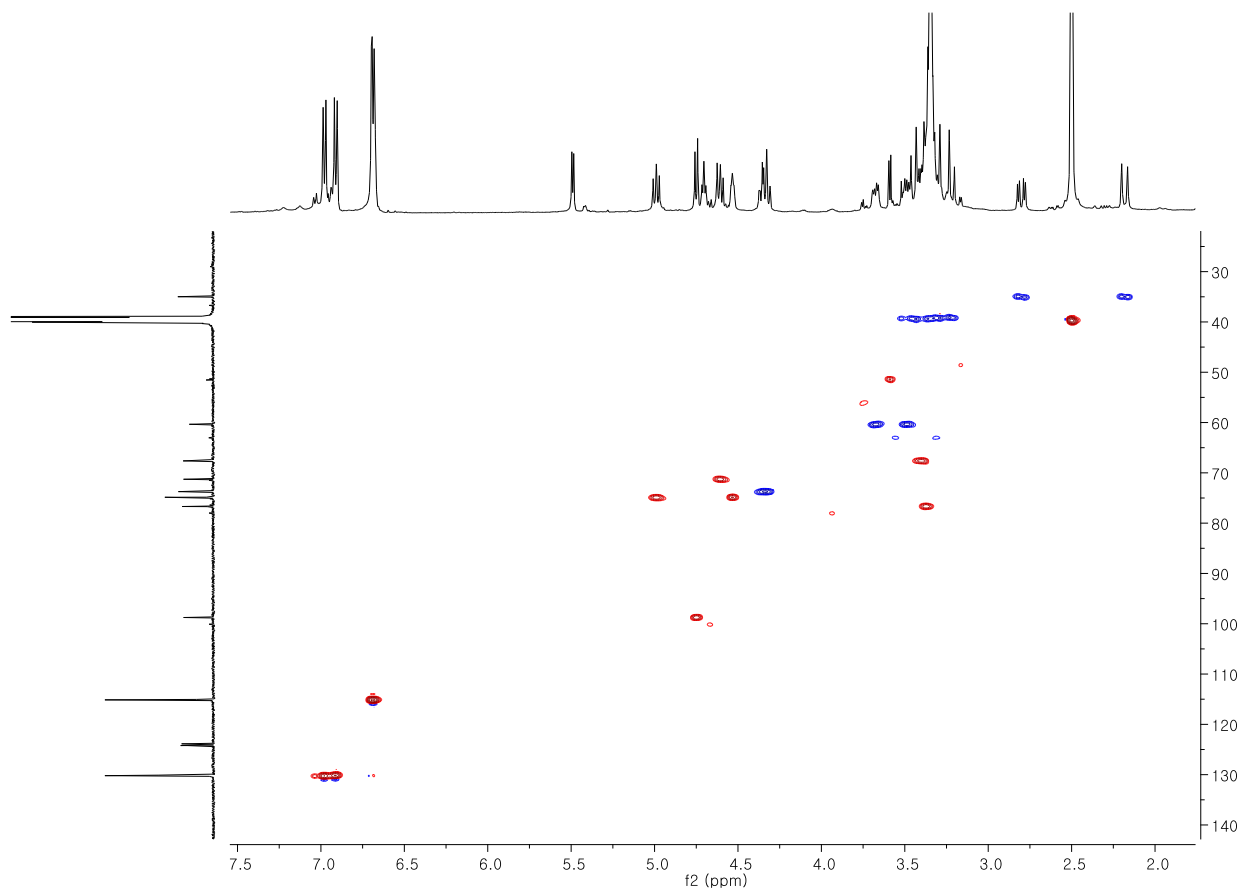


Fig. S3. HSQC spectrum of compound **1**

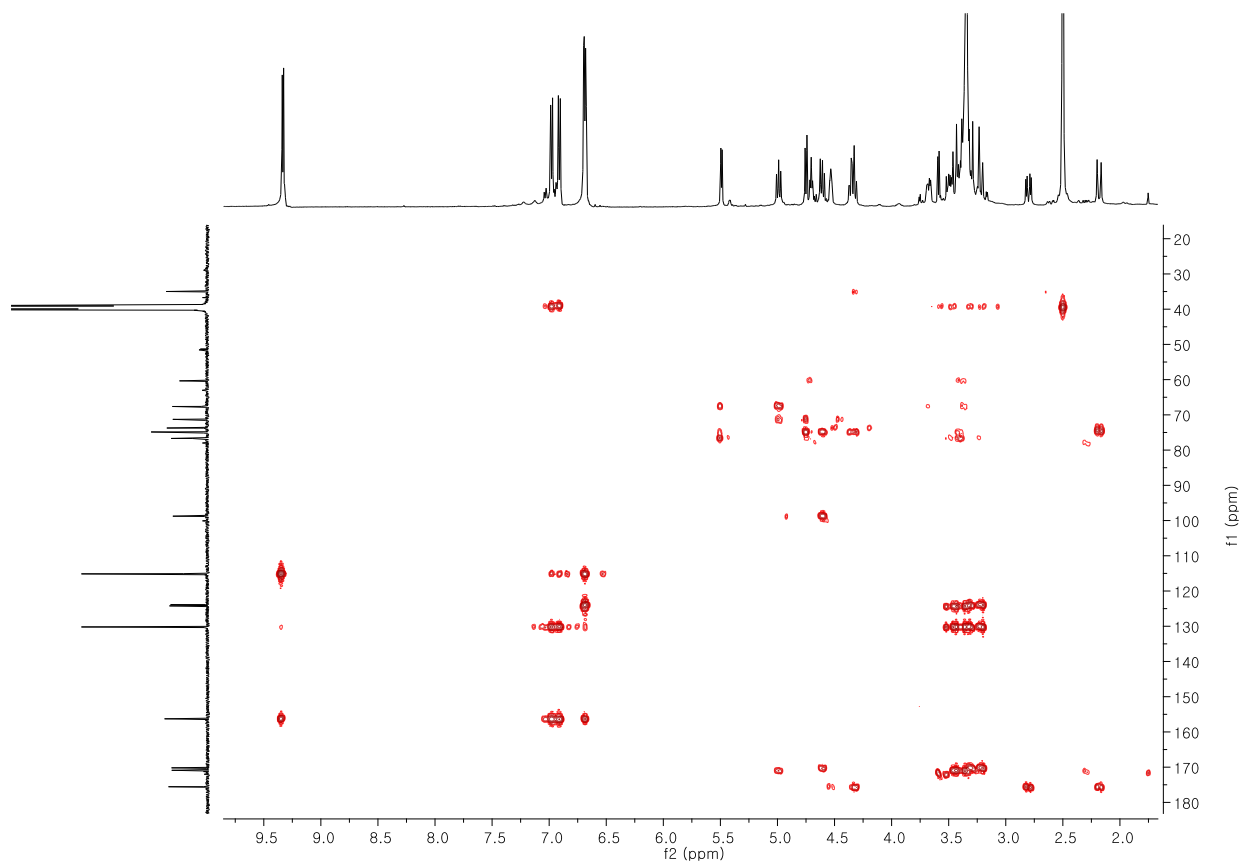


Fig. S4. HMBC spectrum of compound **1**

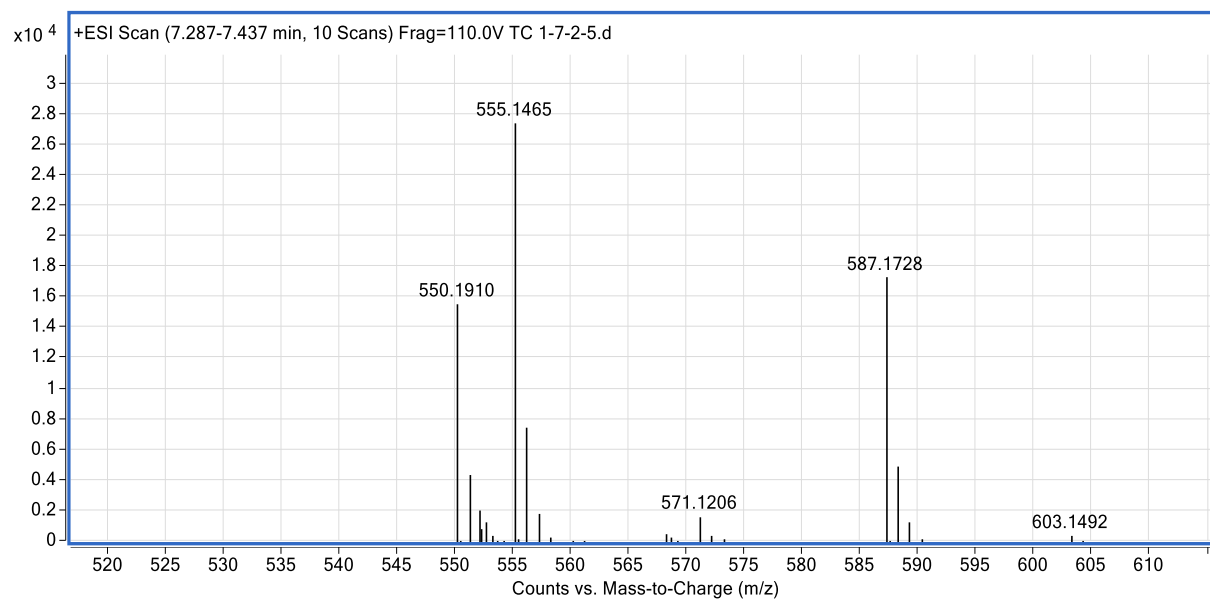


Fig. S5. MS spectrum of compound **1**

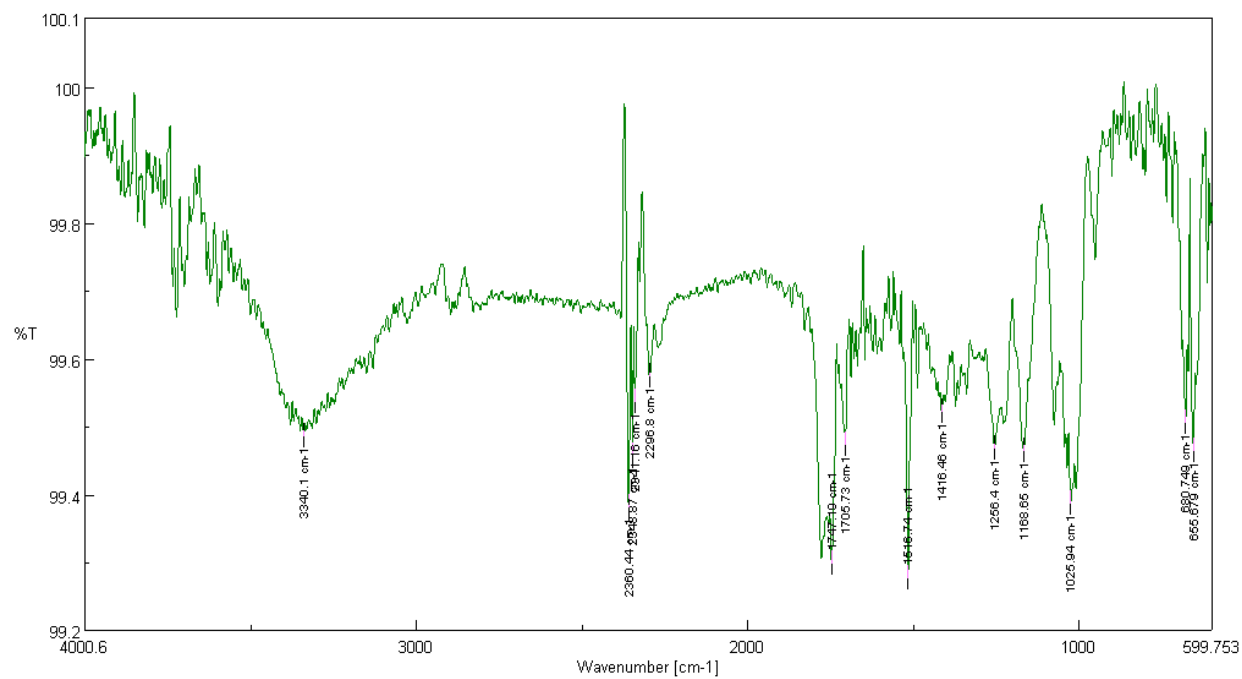
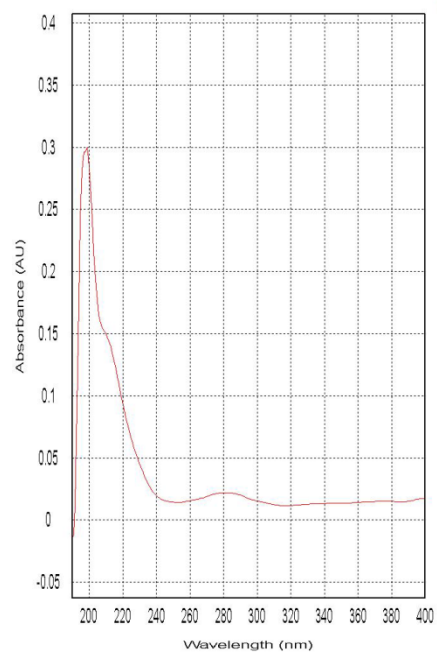


Fig. S6. UV, IR spectra of compound **1**

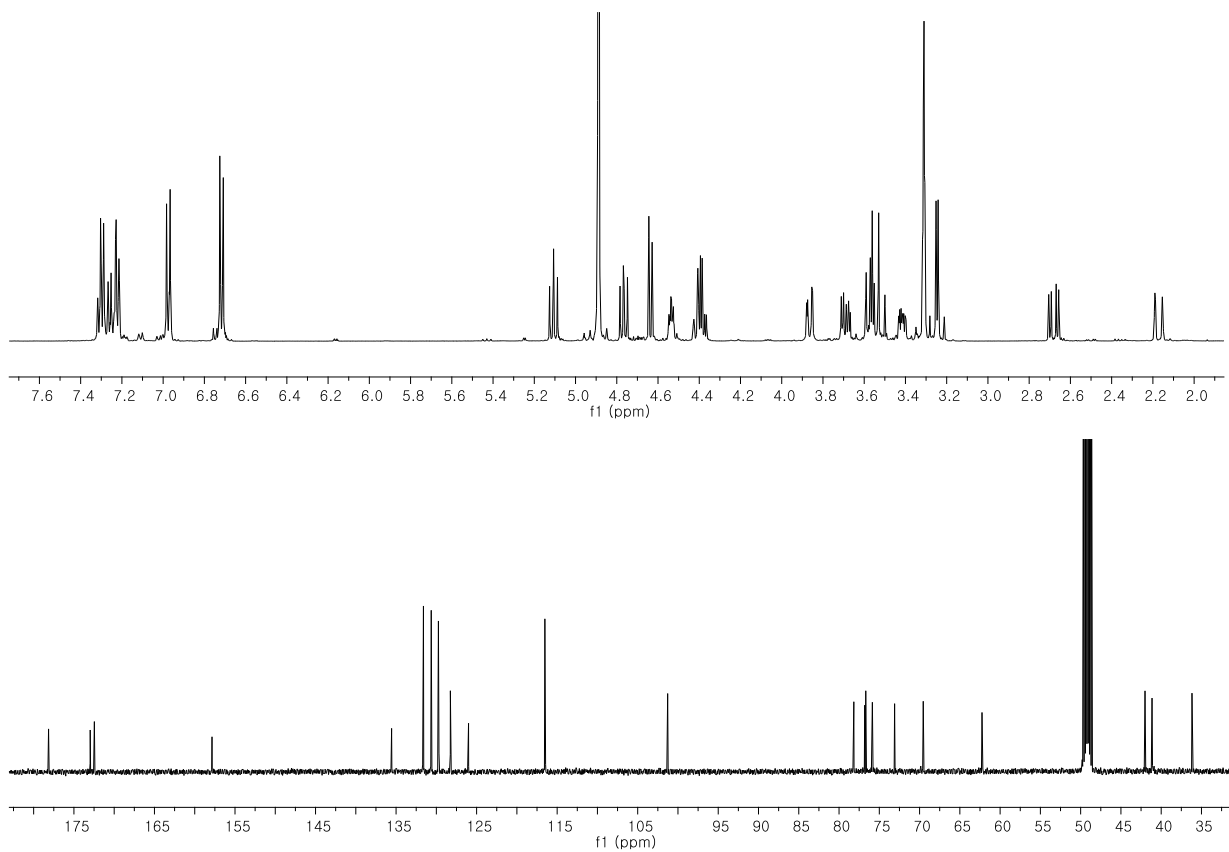


Fig. S7. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **2**

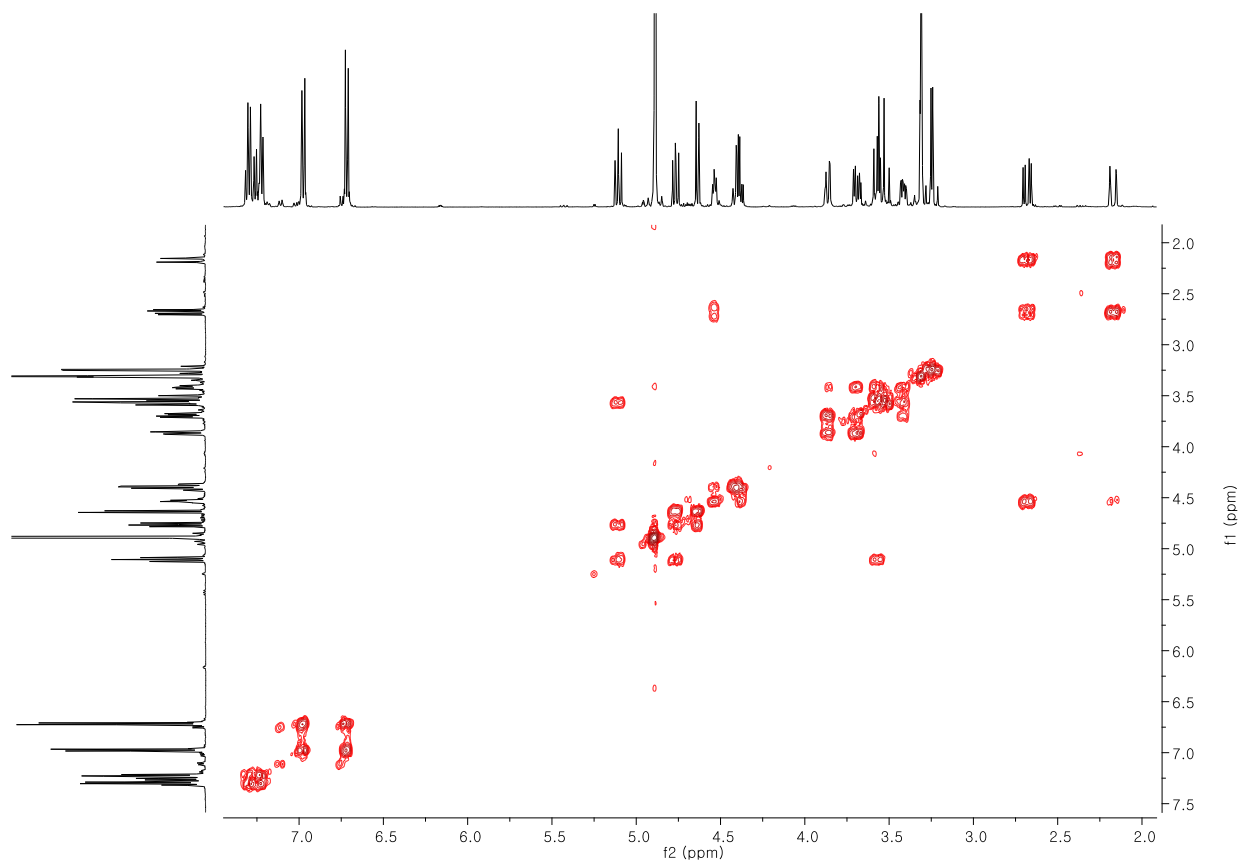


Fig. S8. ^1H - ^1H COSY spectrum of compound **2**

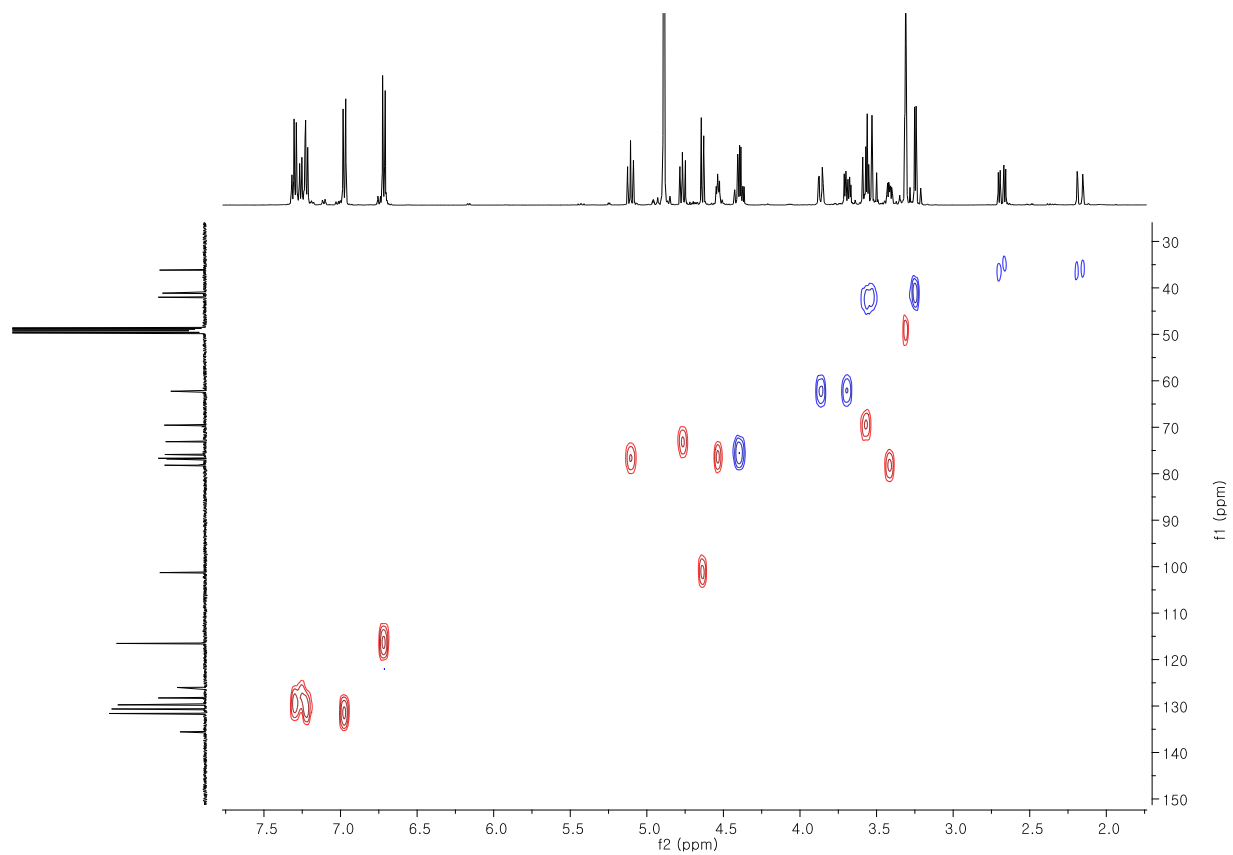


Fig. S9. HSQC spectrum of compound **2**

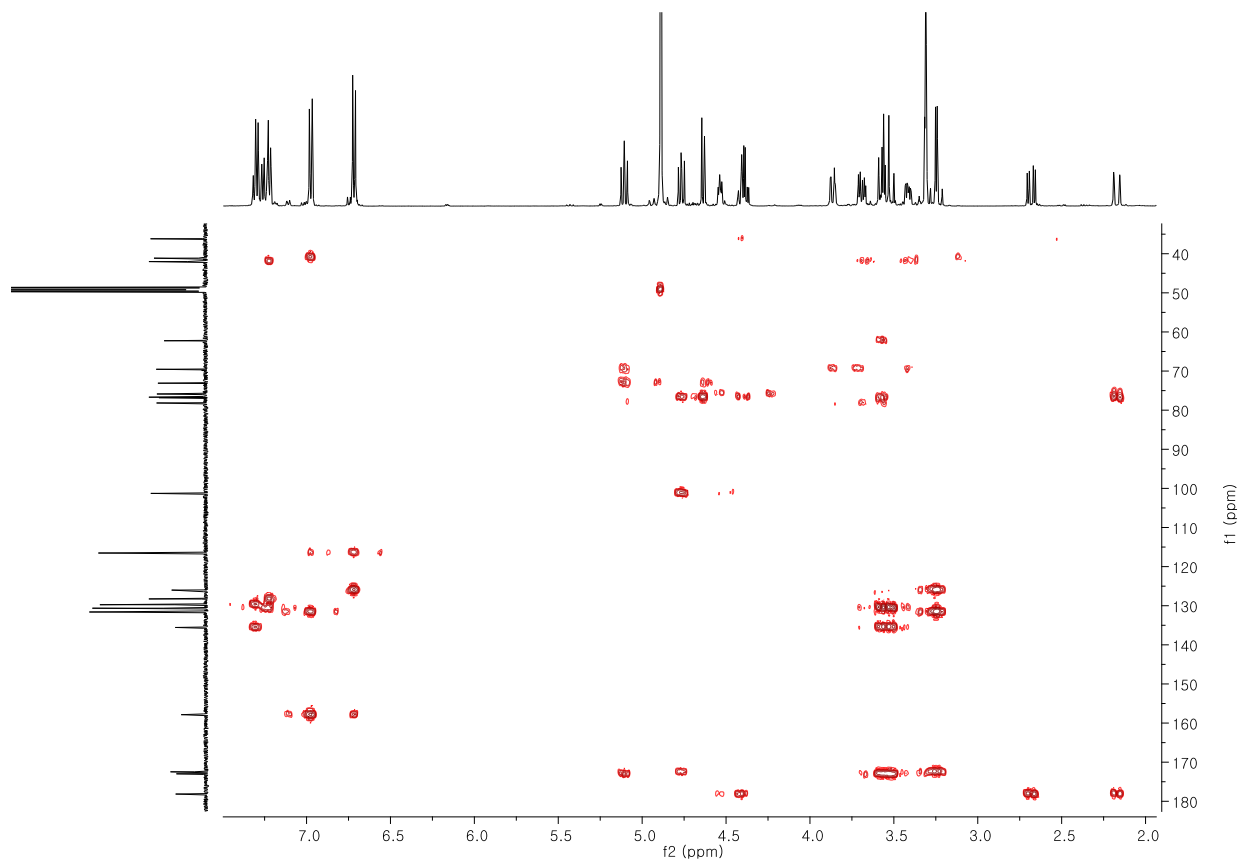


Fig. S10. HMBC spectrum of compound **2**

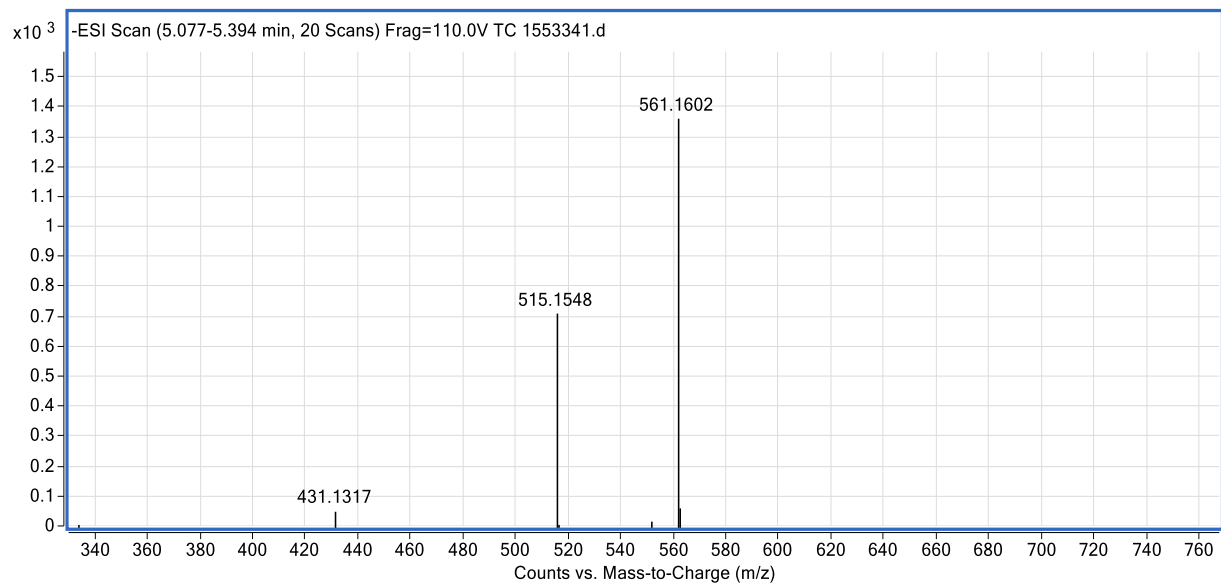


Fig. S11. MS spectrum of compound **2**

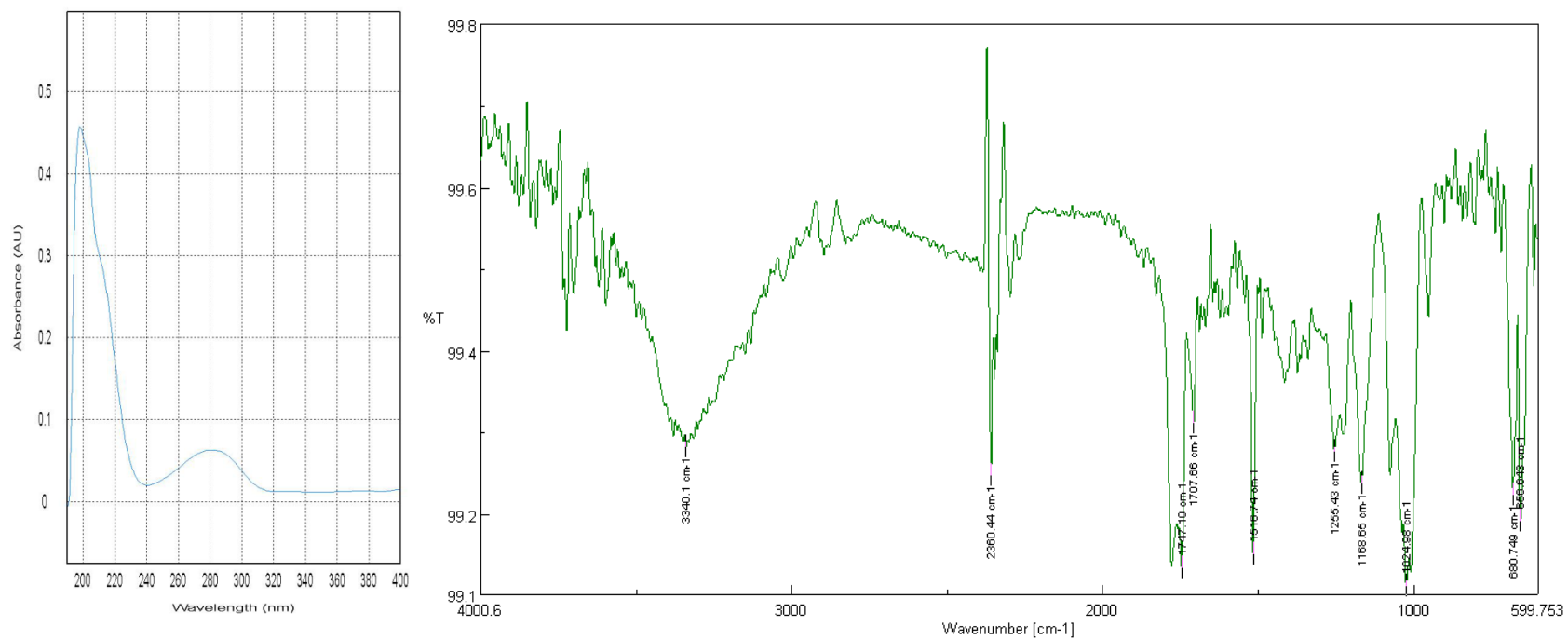


Fig. S12. UV, IR spectra of compound **2**

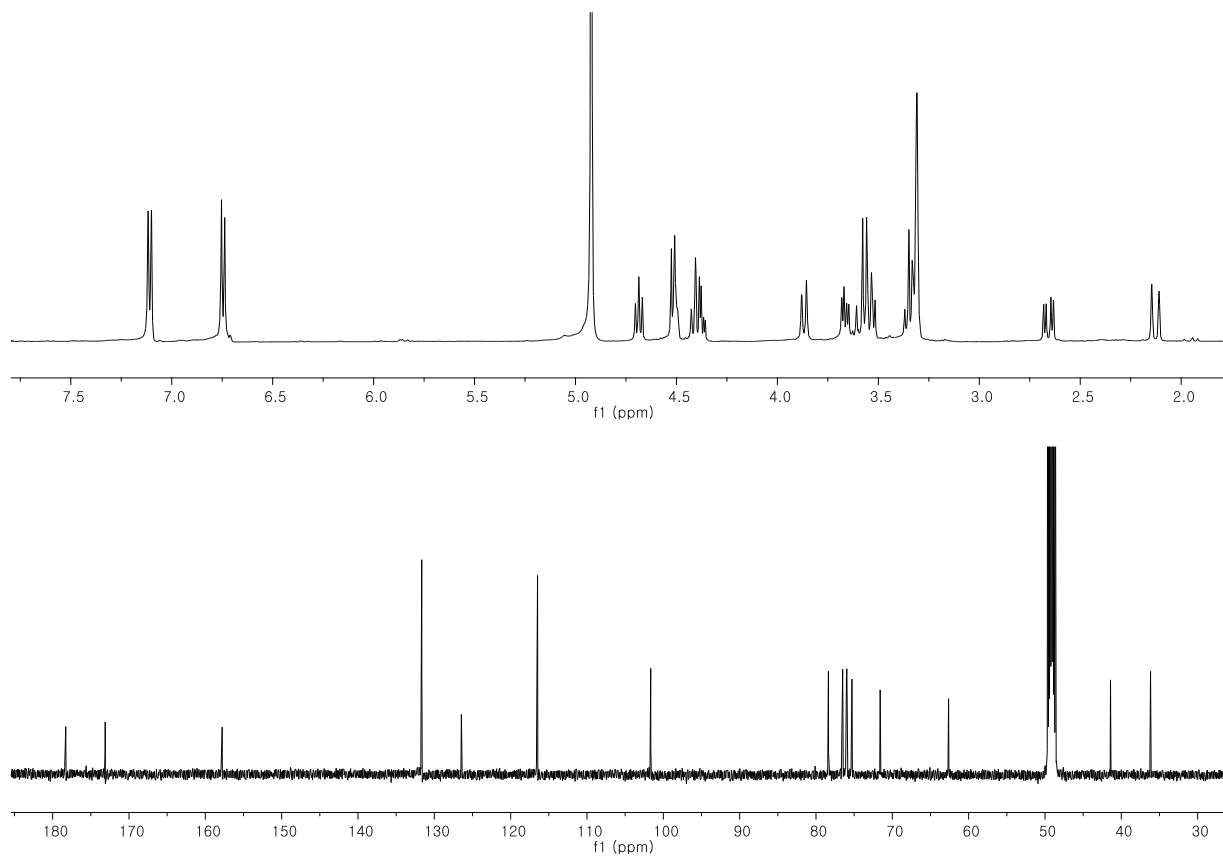


Fig. S13. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **3**

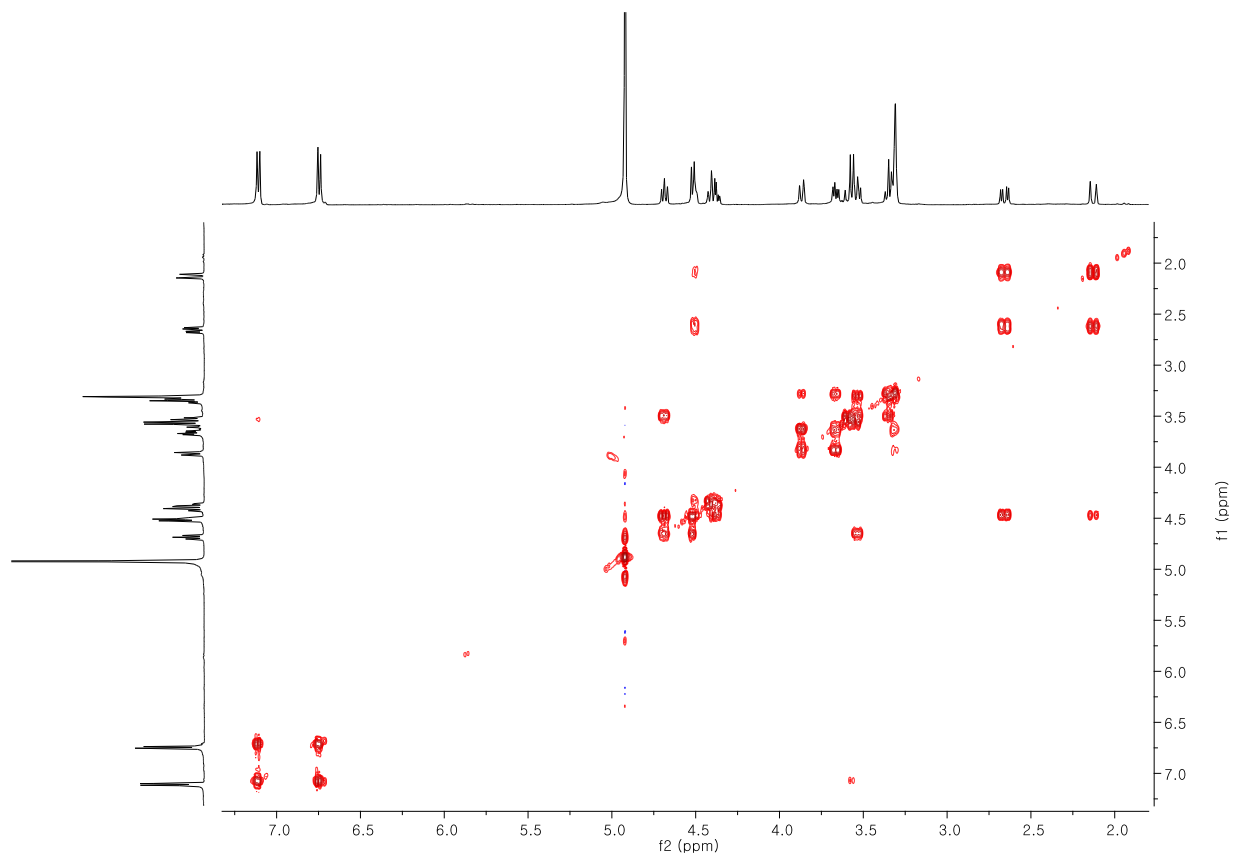


Fig. S14. ^1H - ^1H COSY spectrum of compound **3**

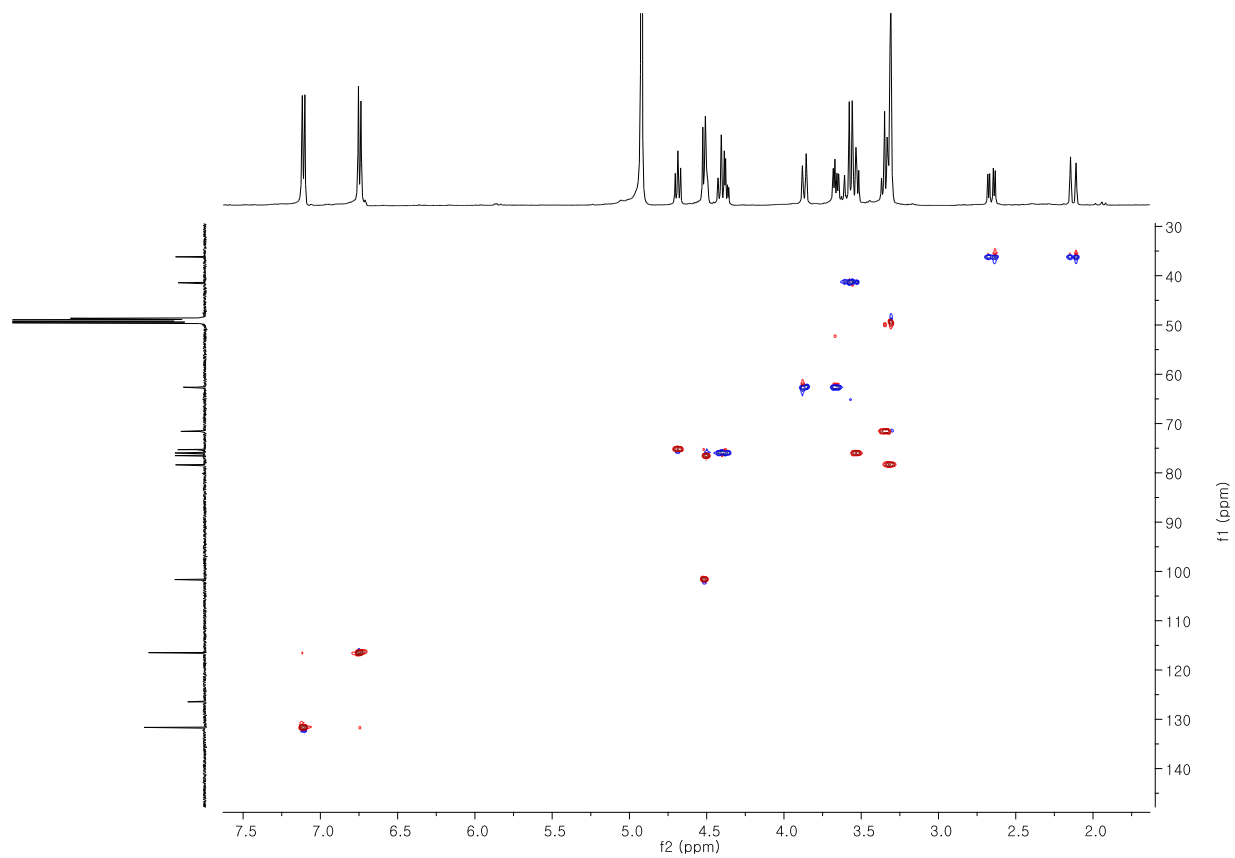


Fig. S15. HSQC spectrum of compound **3**

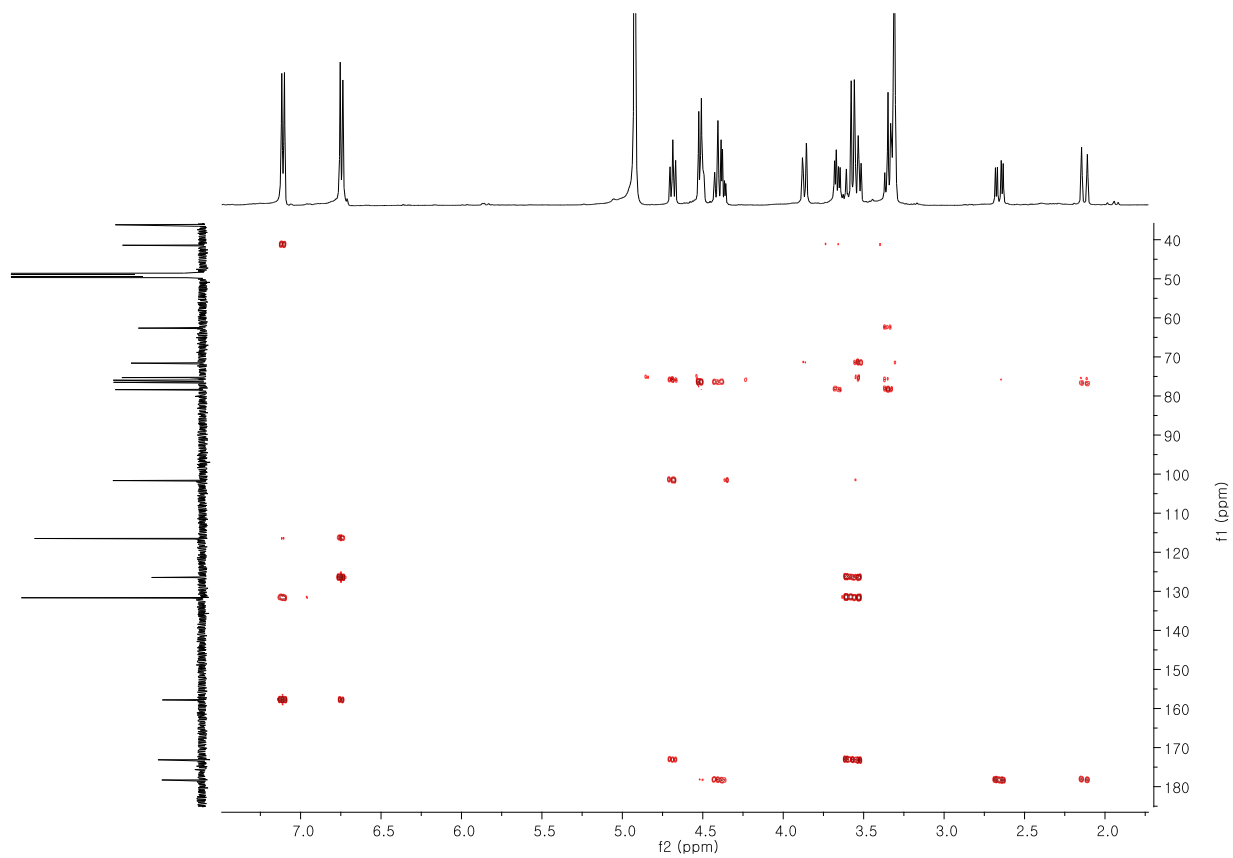


Fig. S16. HMBC spectrum of compound **3**

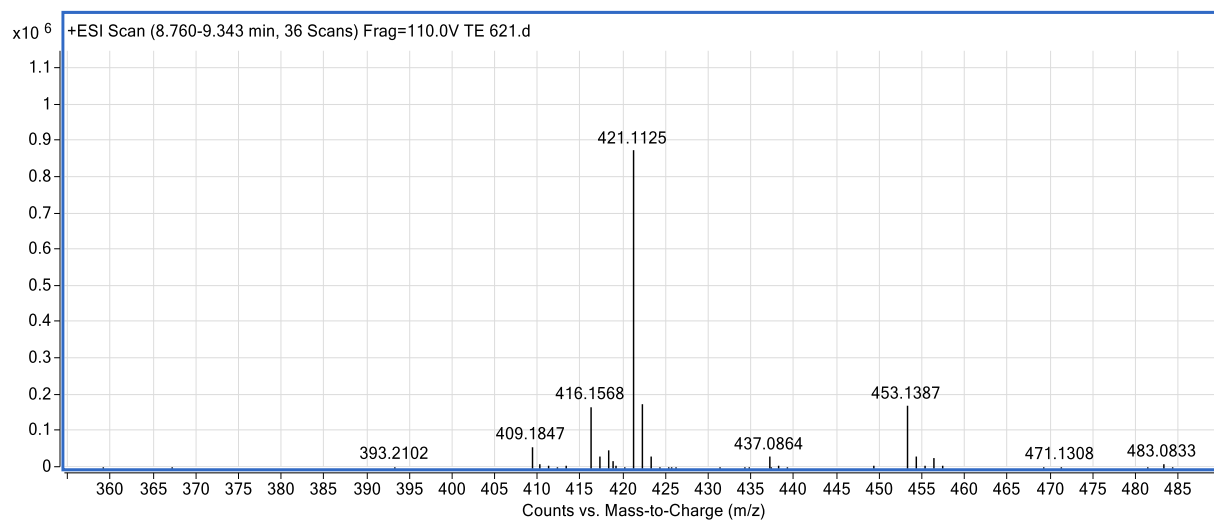


Fig. S17. MS spectrum of compound **3**

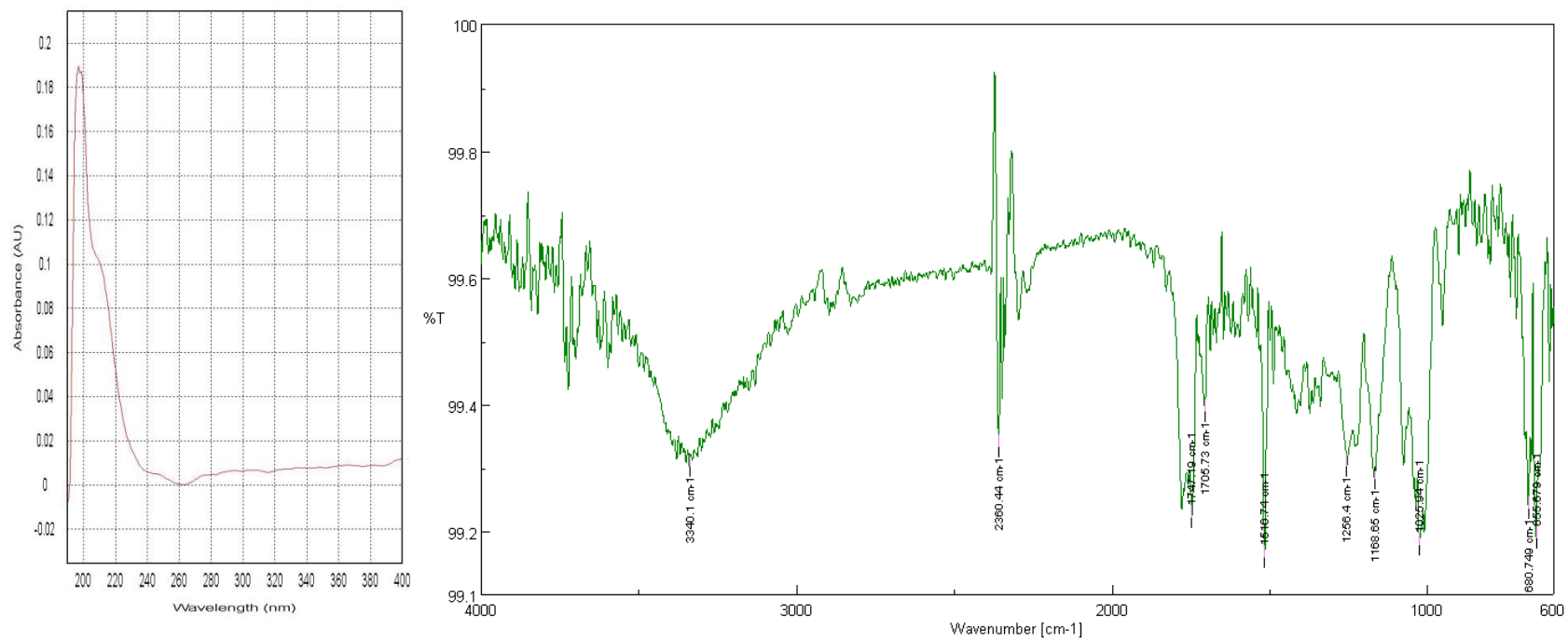


Fig. S18. UV, IR spectra of compound **3**

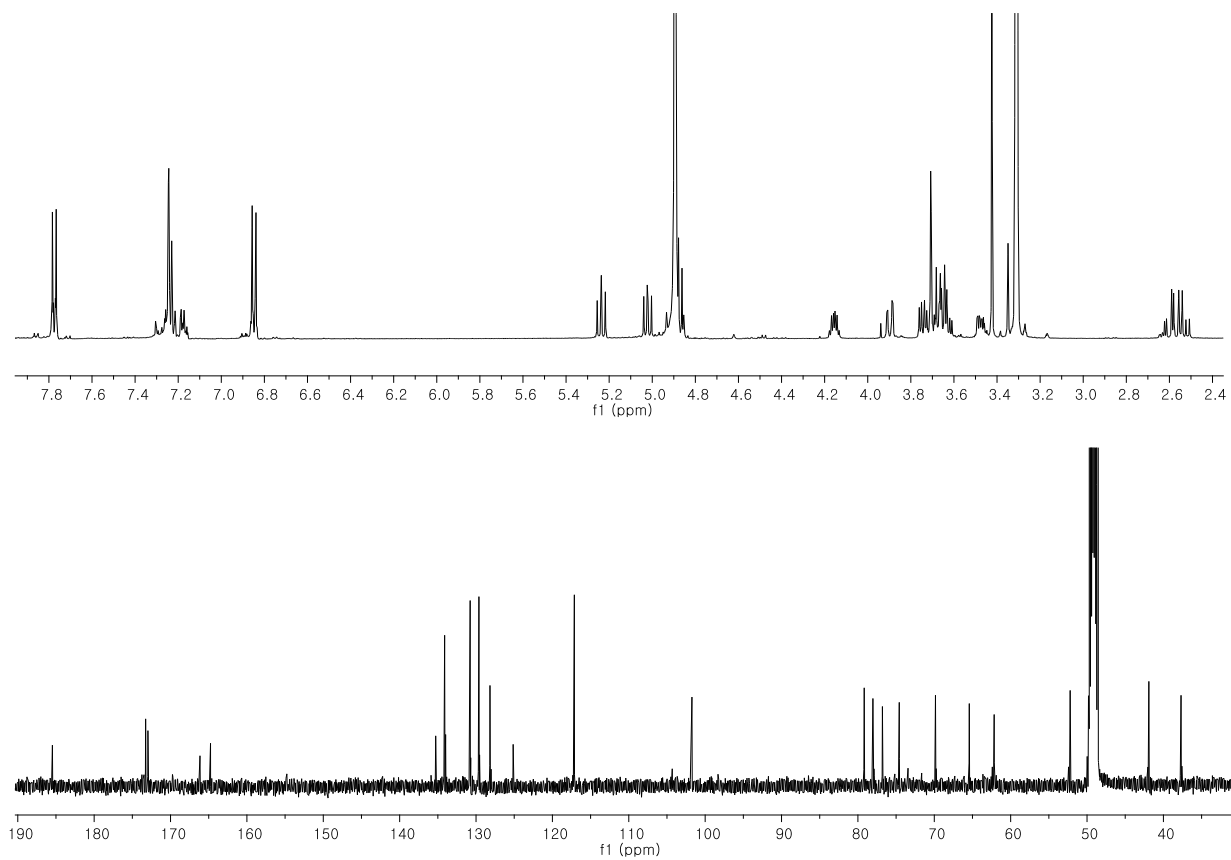


Fig. S19. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **4**

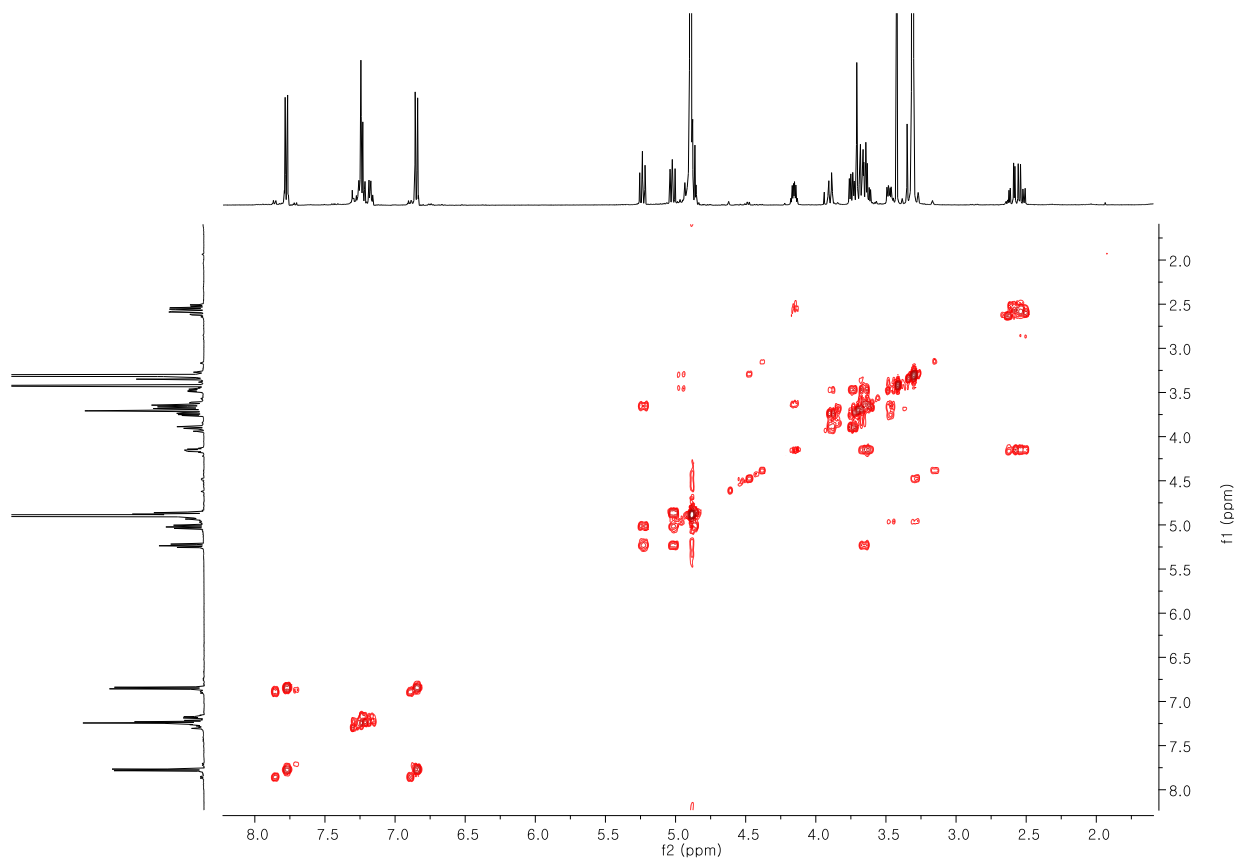


Fig. S20. ^1H - ^1H COSY spectrum of compound **4**

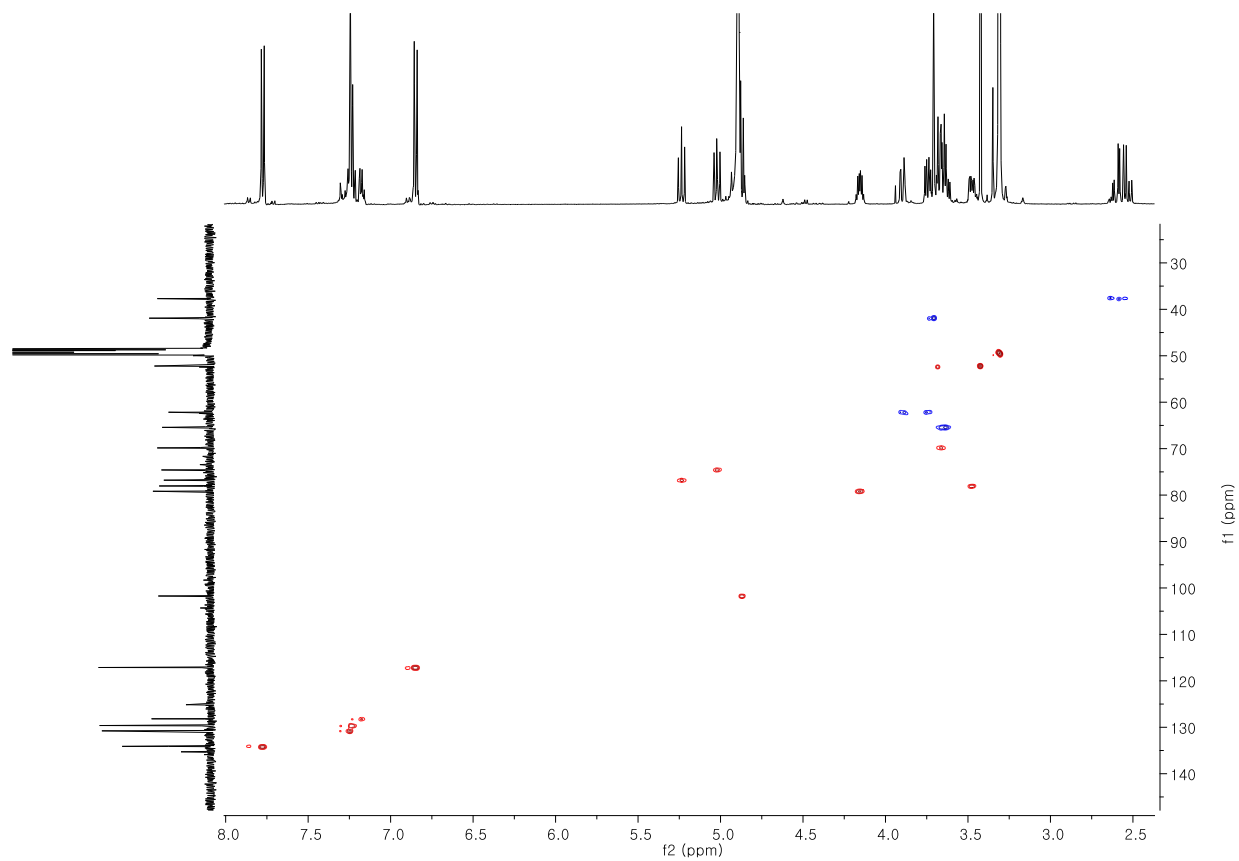


Fig. S21. HSQC spectrum of compound **4**

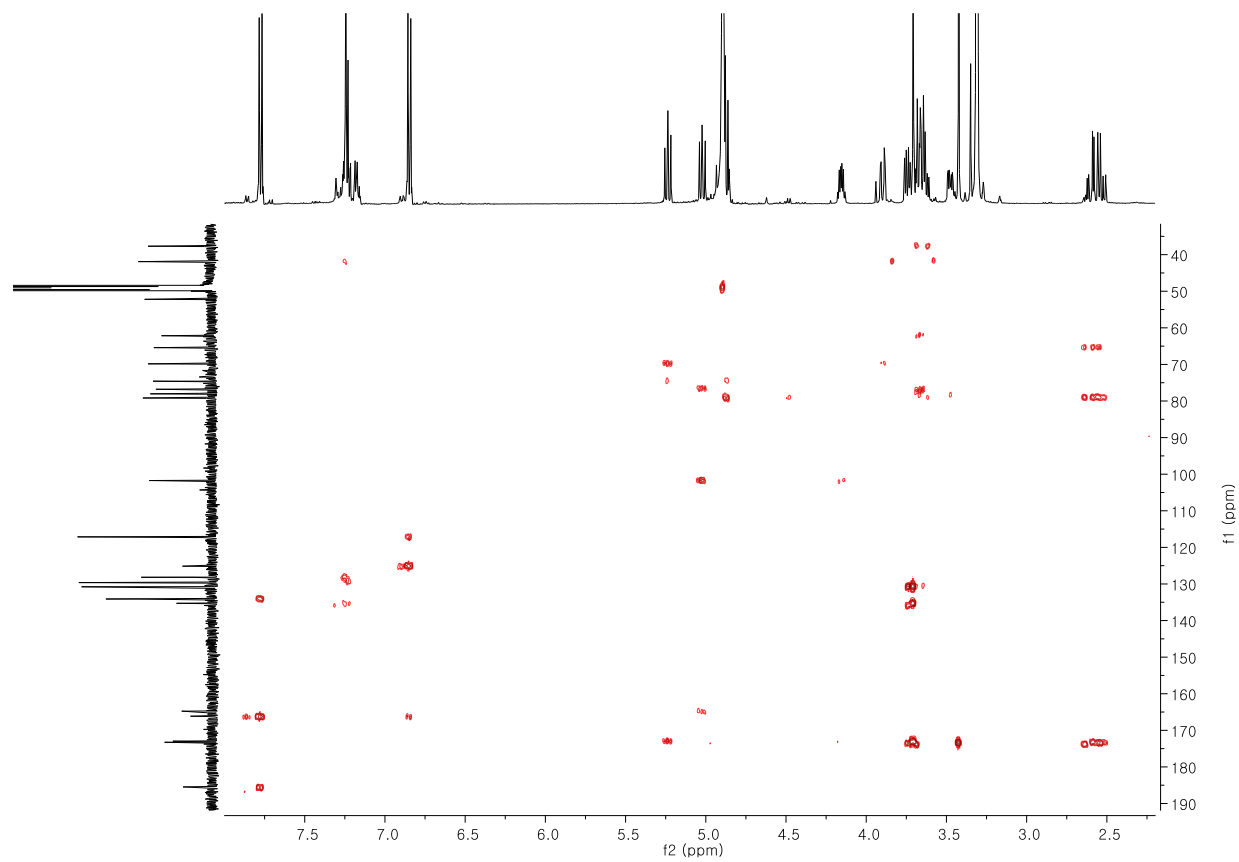


Fig. S22. HMBC spectrum of compound **4**

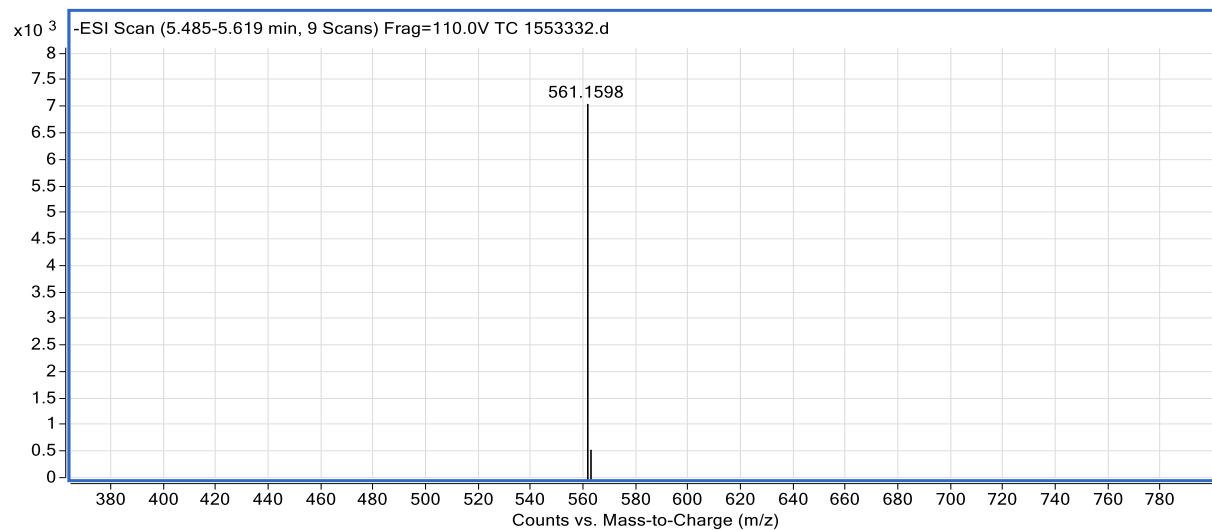


Fig. S23. MS spectrum of compound **4**

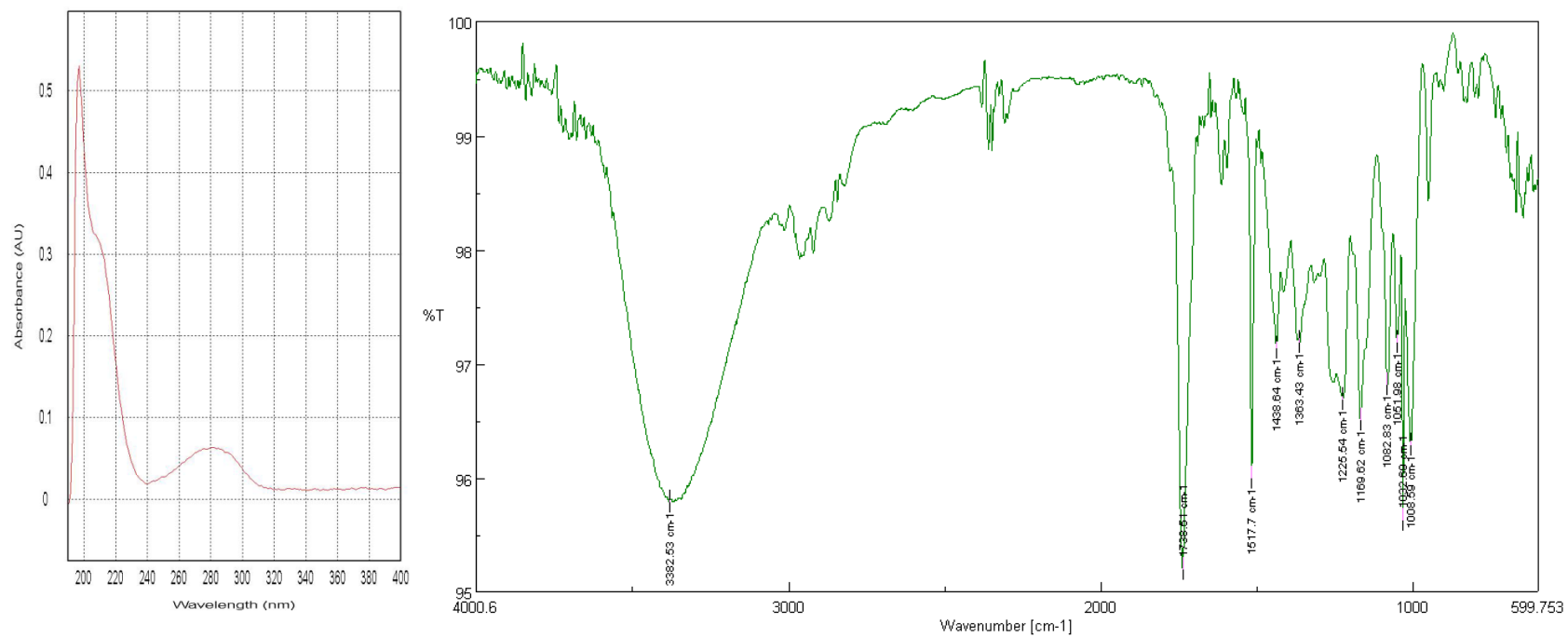


Fig. S24. UV, IR spectra of compound **4**

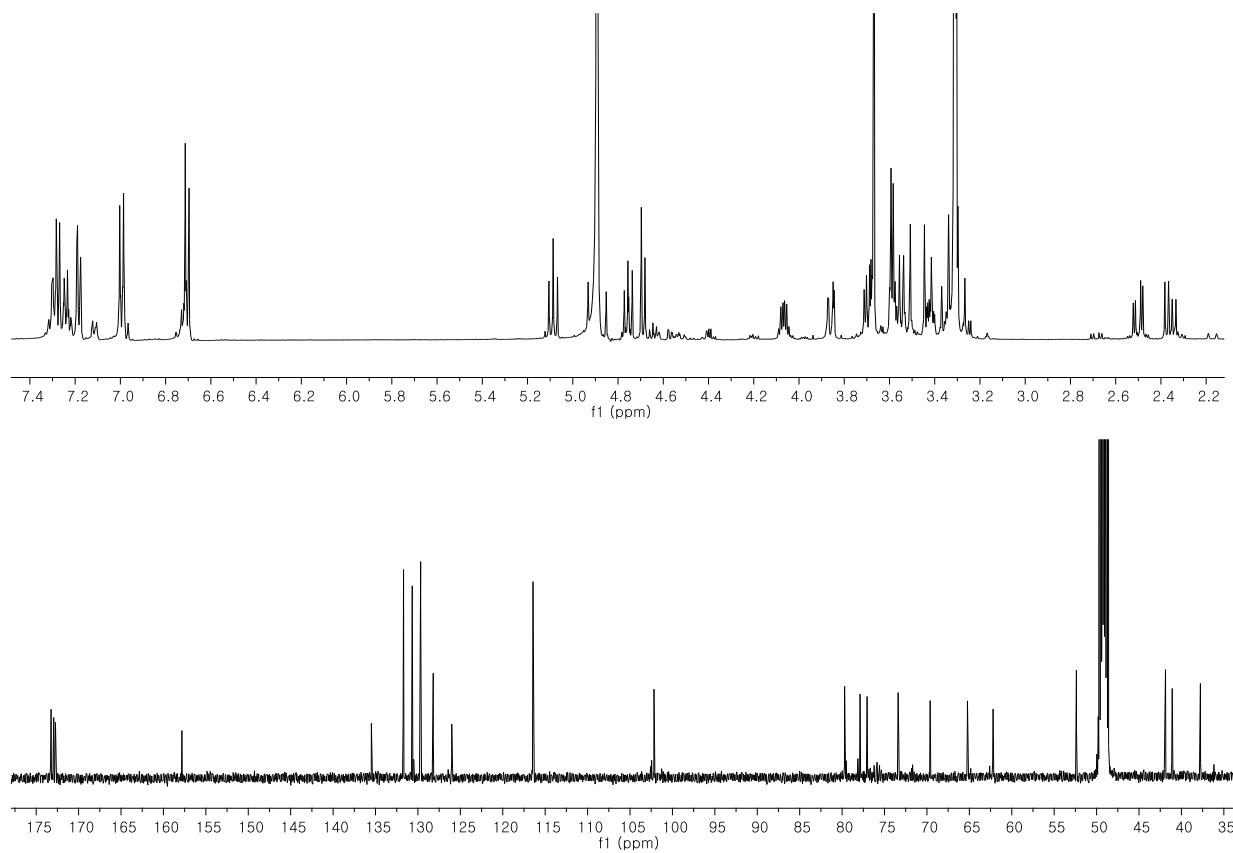


Fig. S25. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **5**

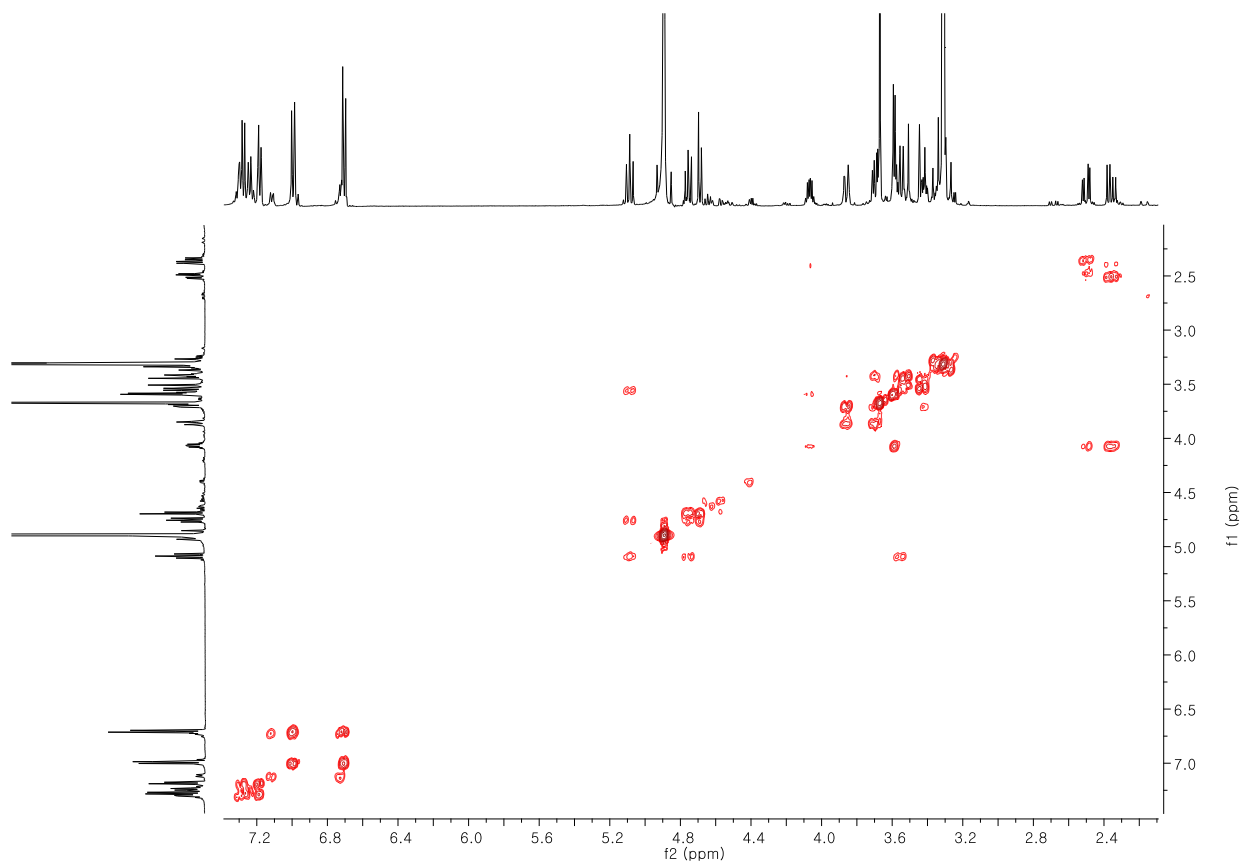


Fig. S26. ^1H - ^1H COSY spectrum of compound **5**

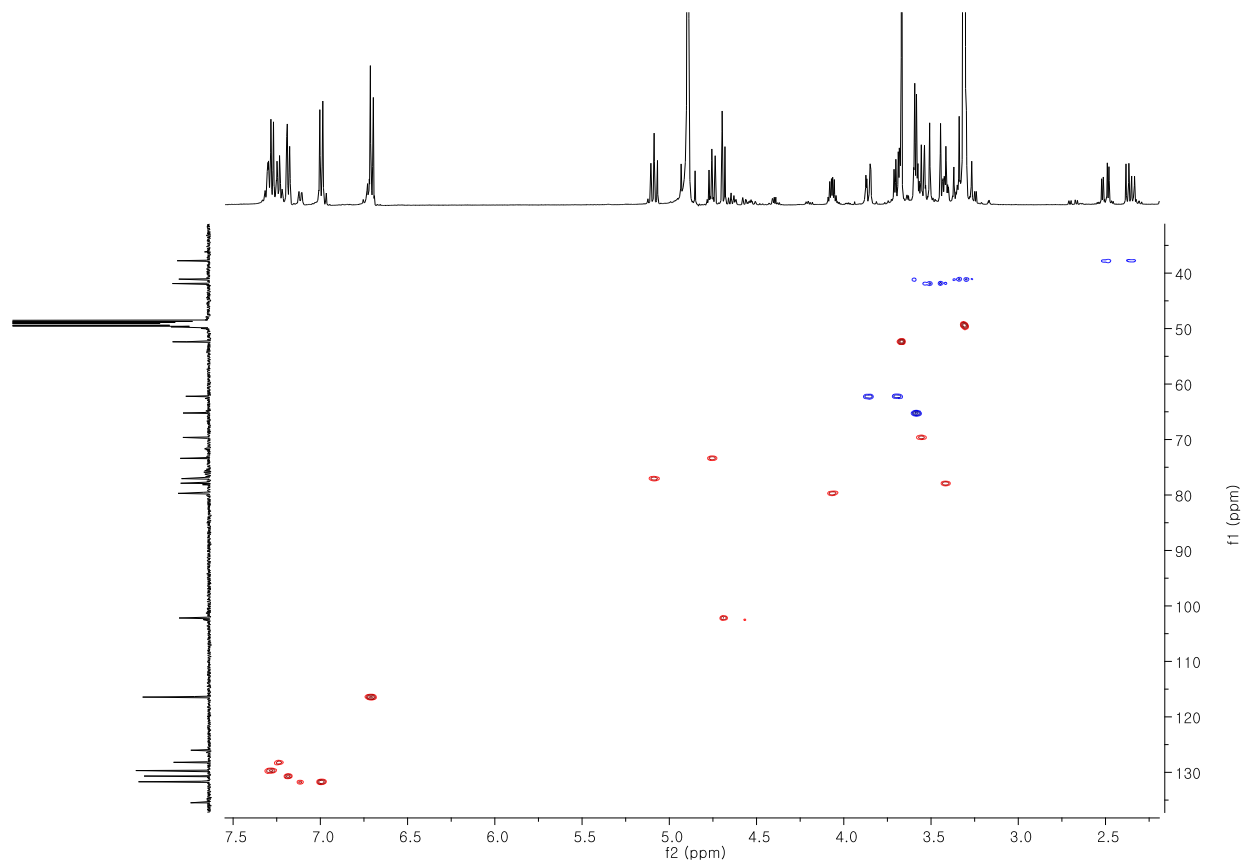


Fig. S27. HSQC spectrum of compound **5**

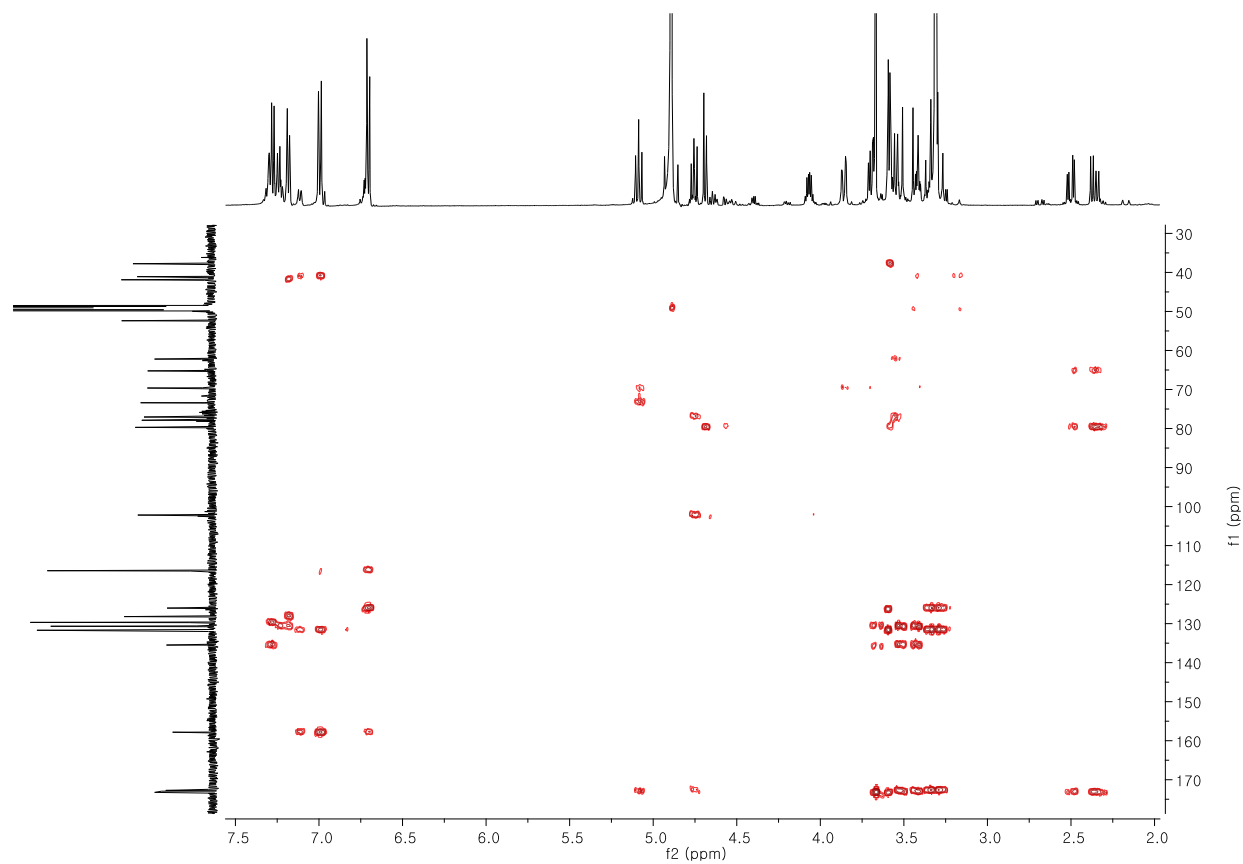


Fig. S28. HMBC spectrum of compound **5**

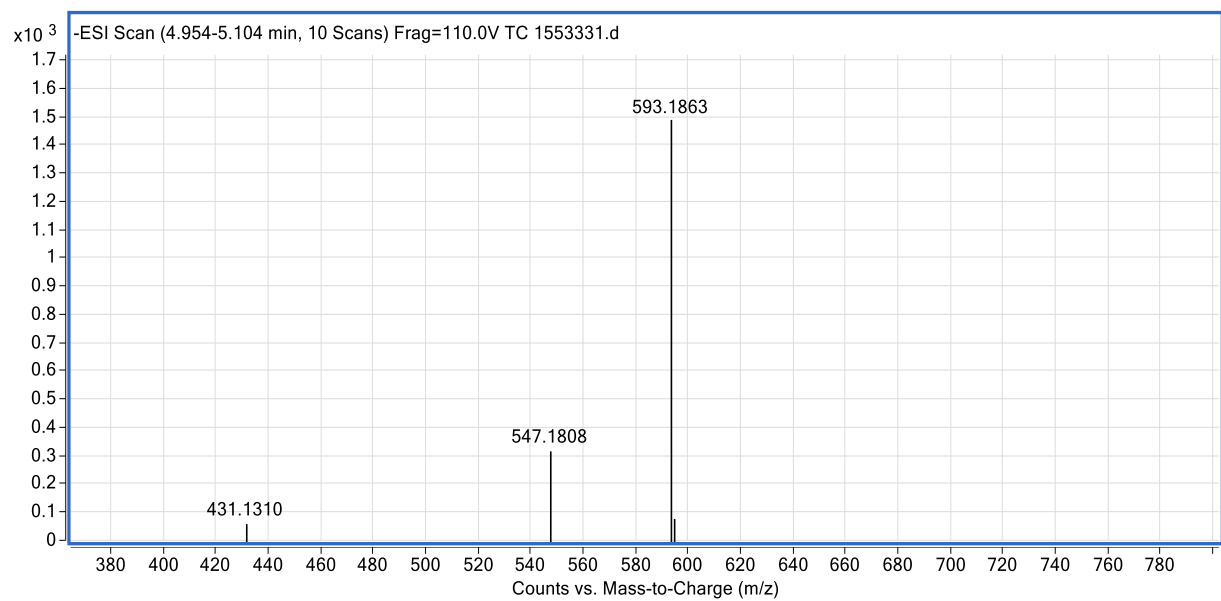


Fig. S29. MS spectrum of compound **5**

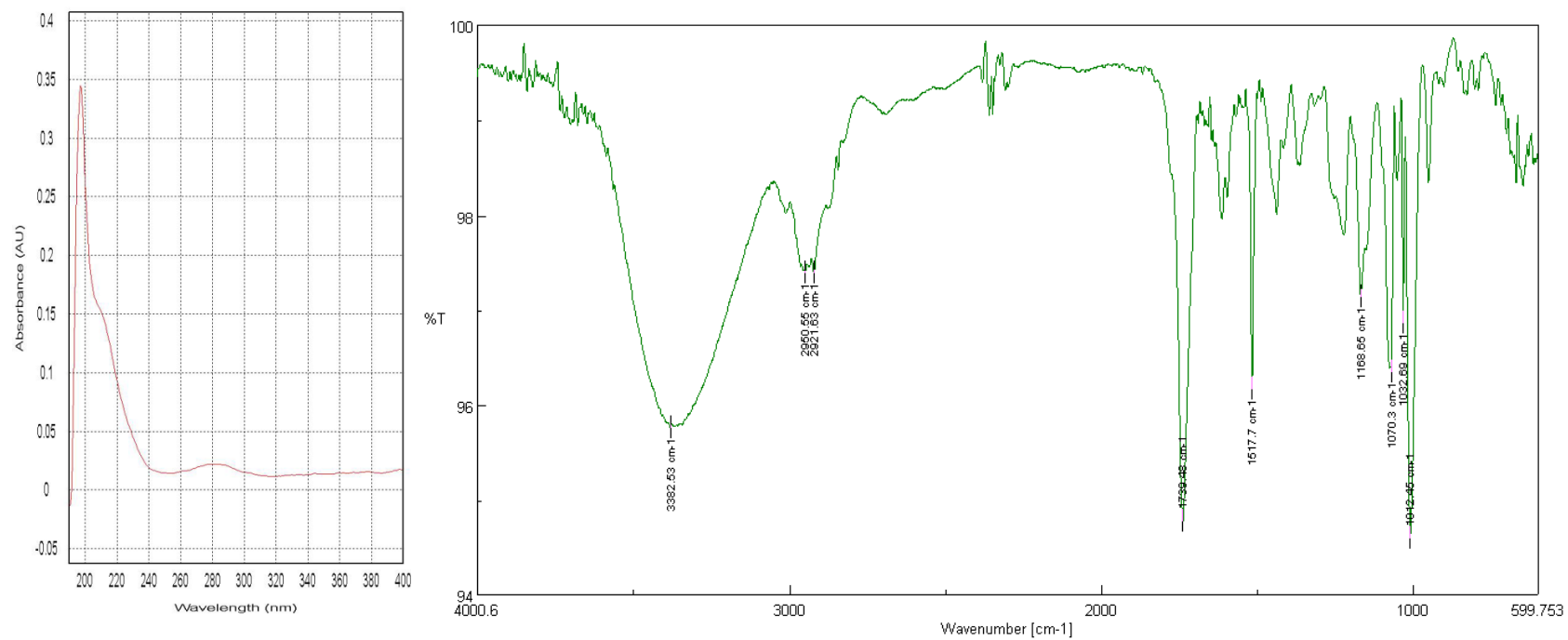


Fig. S30. UV, IR spectra of compound **5**

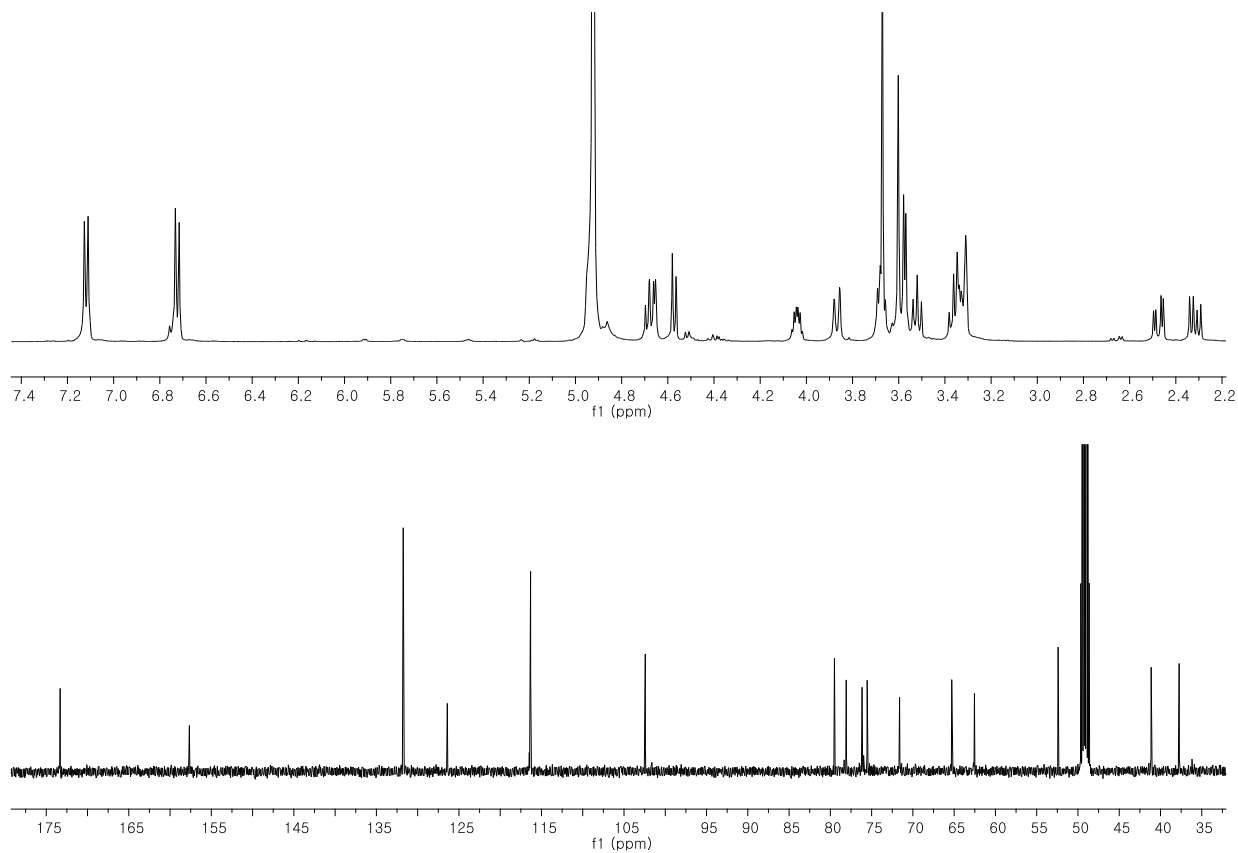


Fig. S31. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound 6

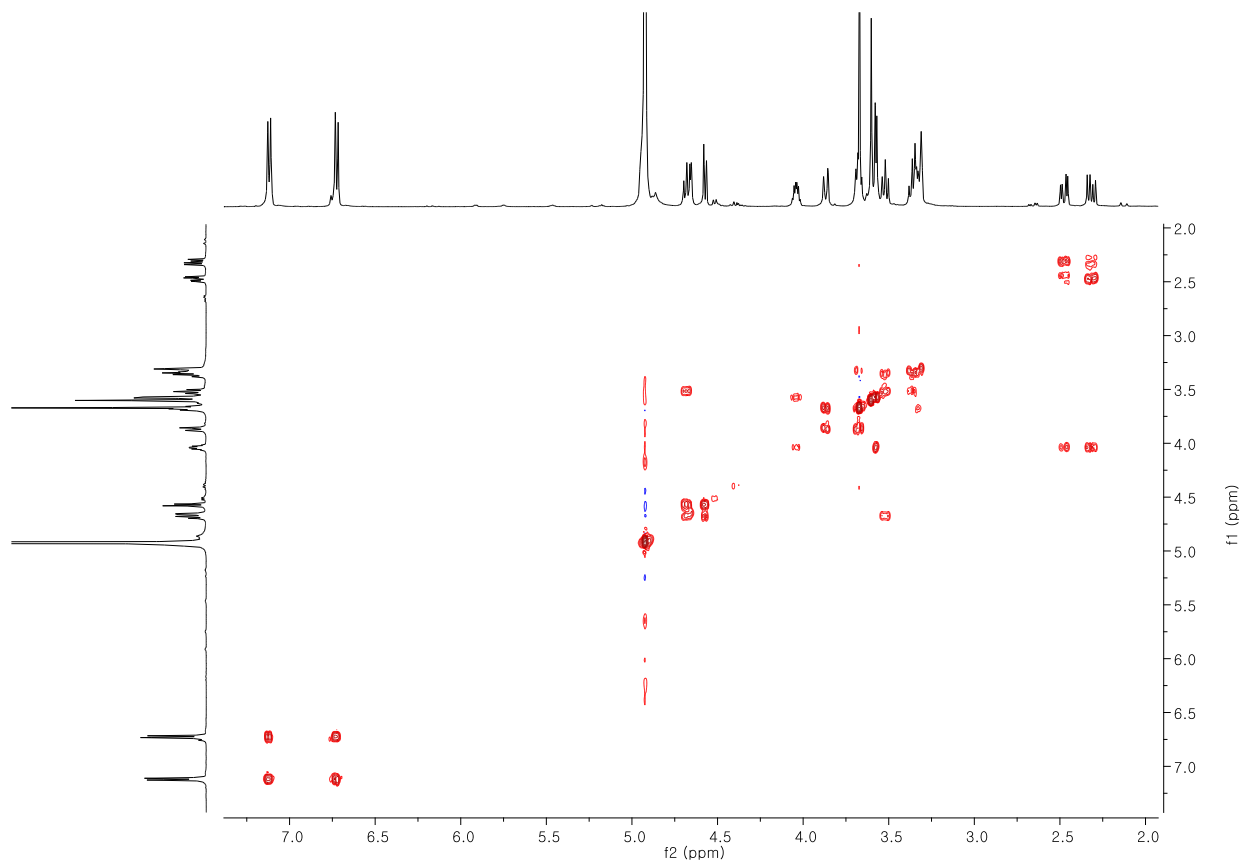


Fig. S32. ^1H - ^1H COSY spectrum of compound **6**

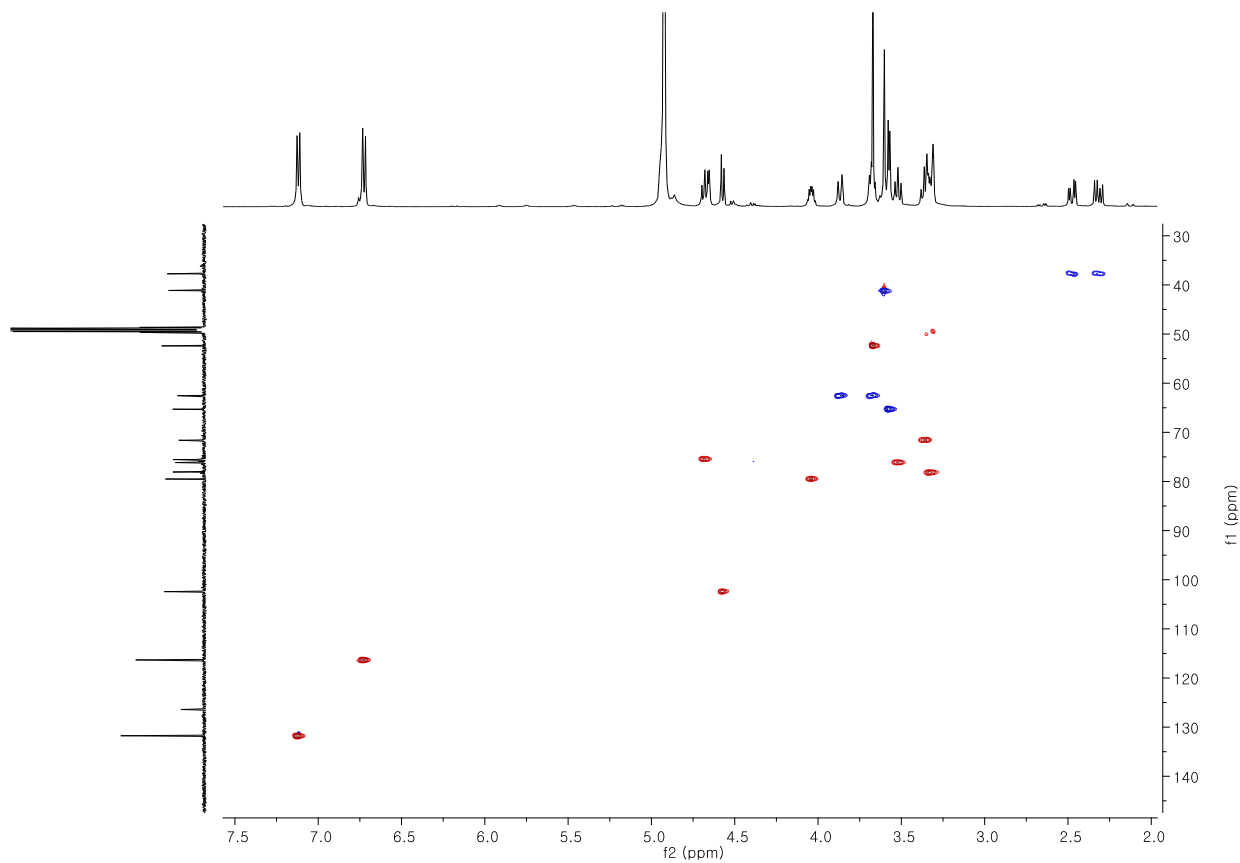


Fig. S33. HSQC spectrum of compound **6**

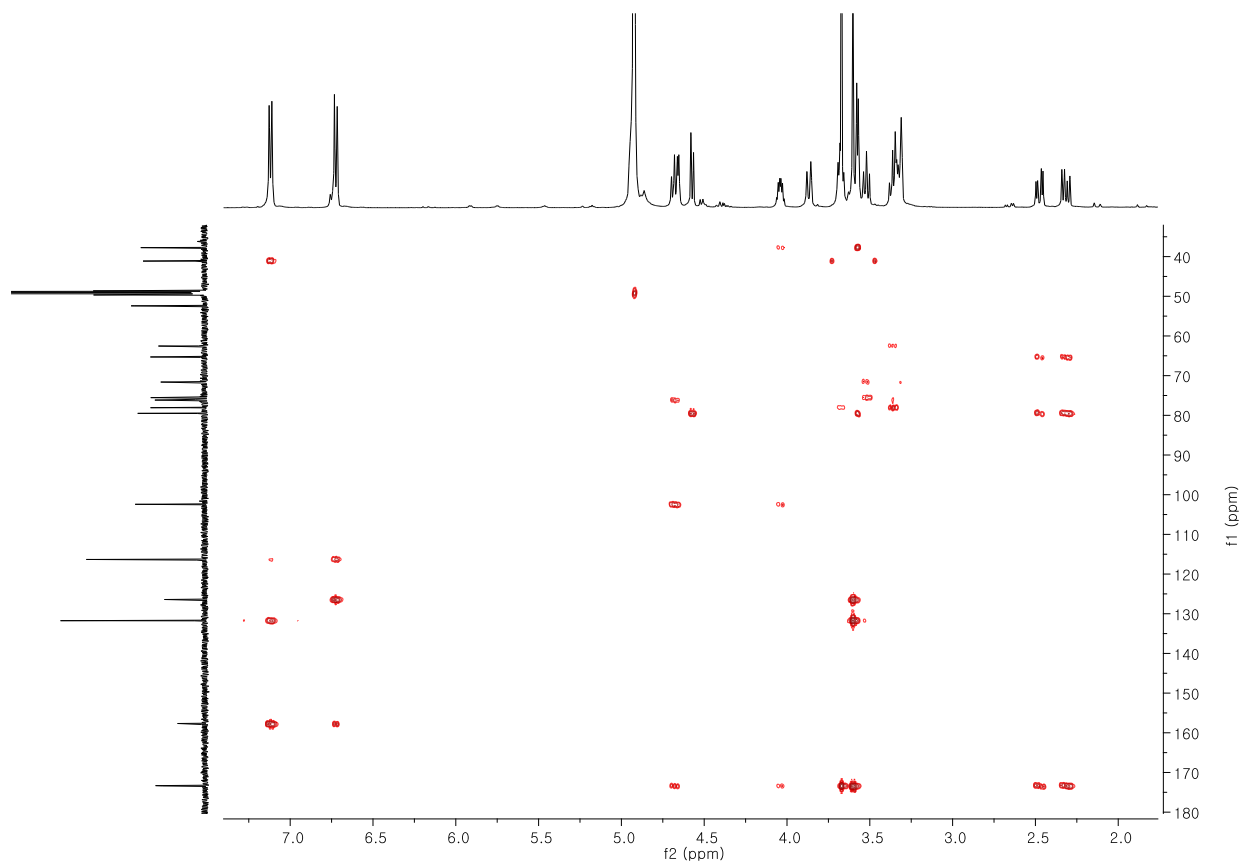


Fig. S34. HMBC spectrum of compound **6**

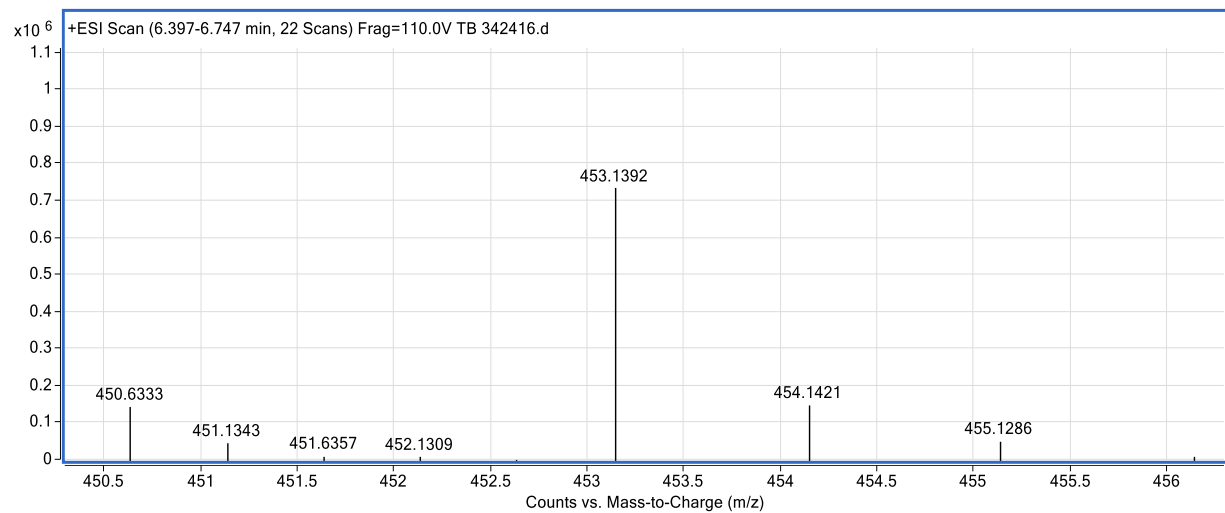


Fig. S35. MS spectrum of compound **6**

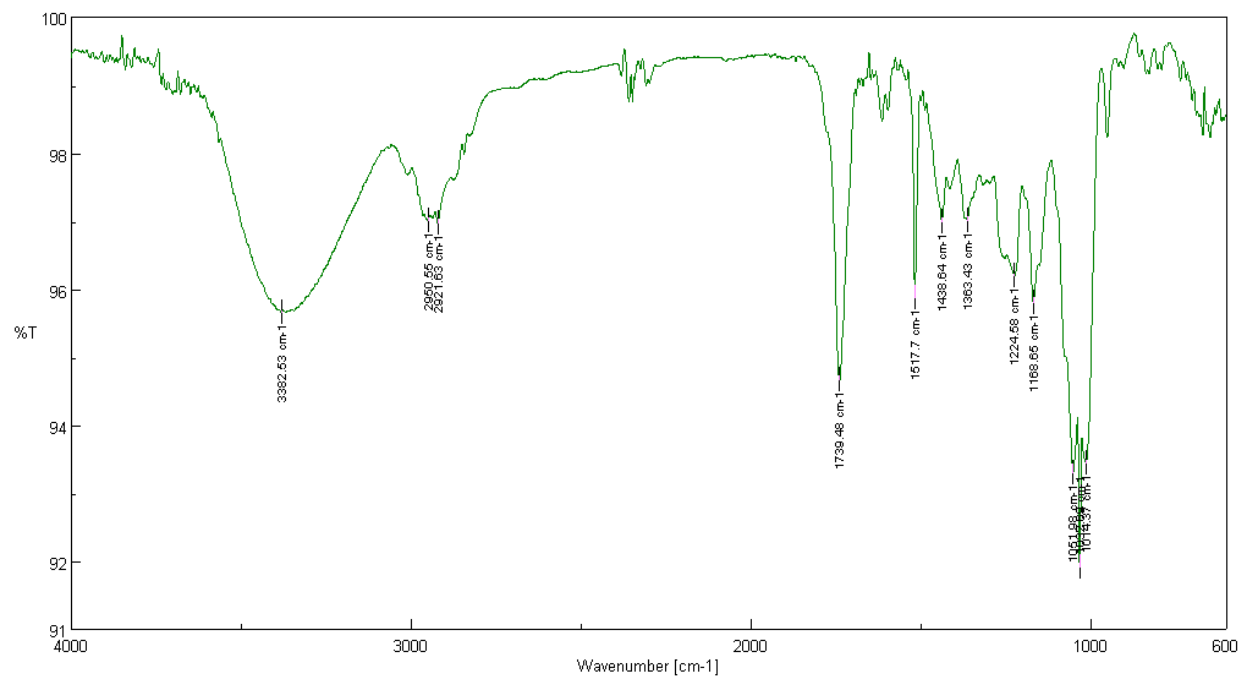
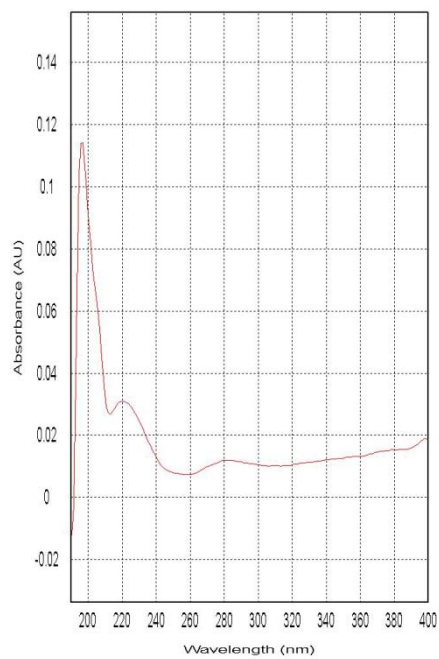


Fig. S36. UV, IR spectra of compound **6**

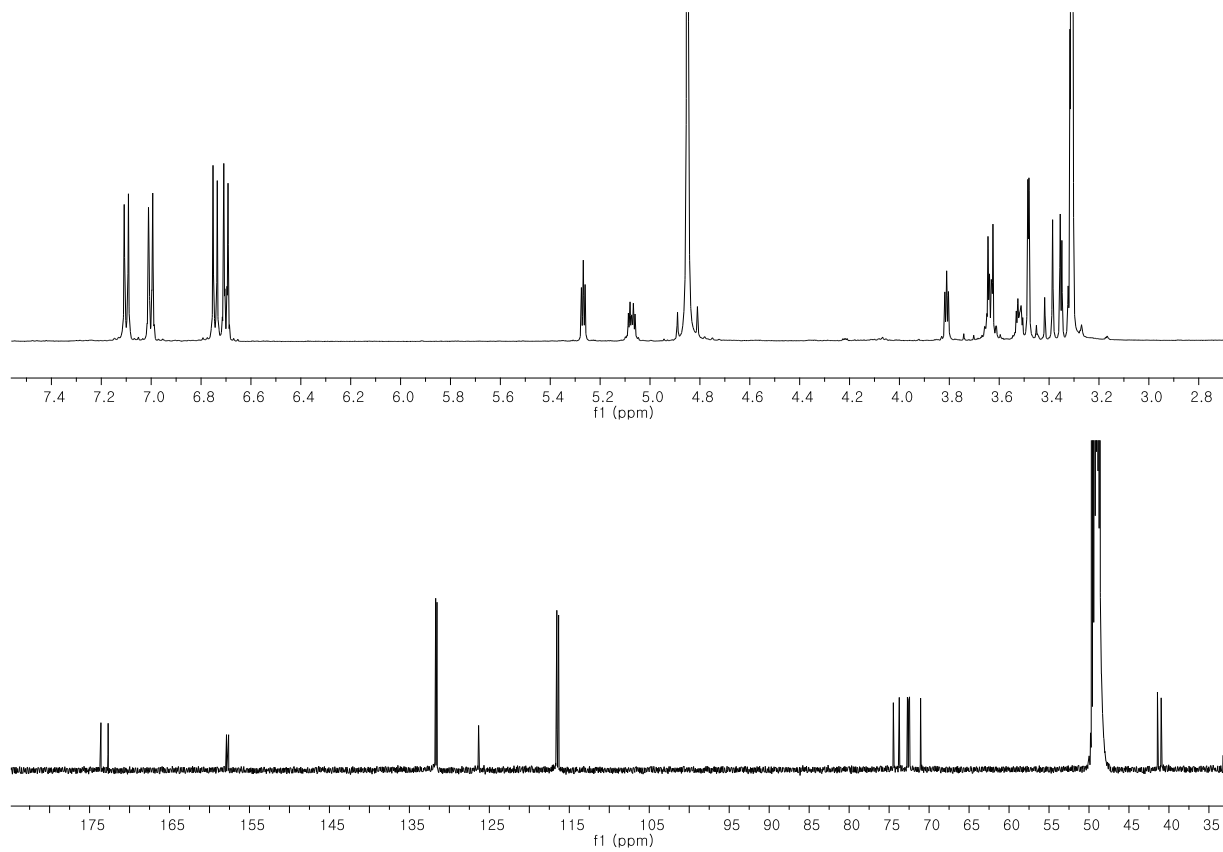


Fig. S37. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **7**

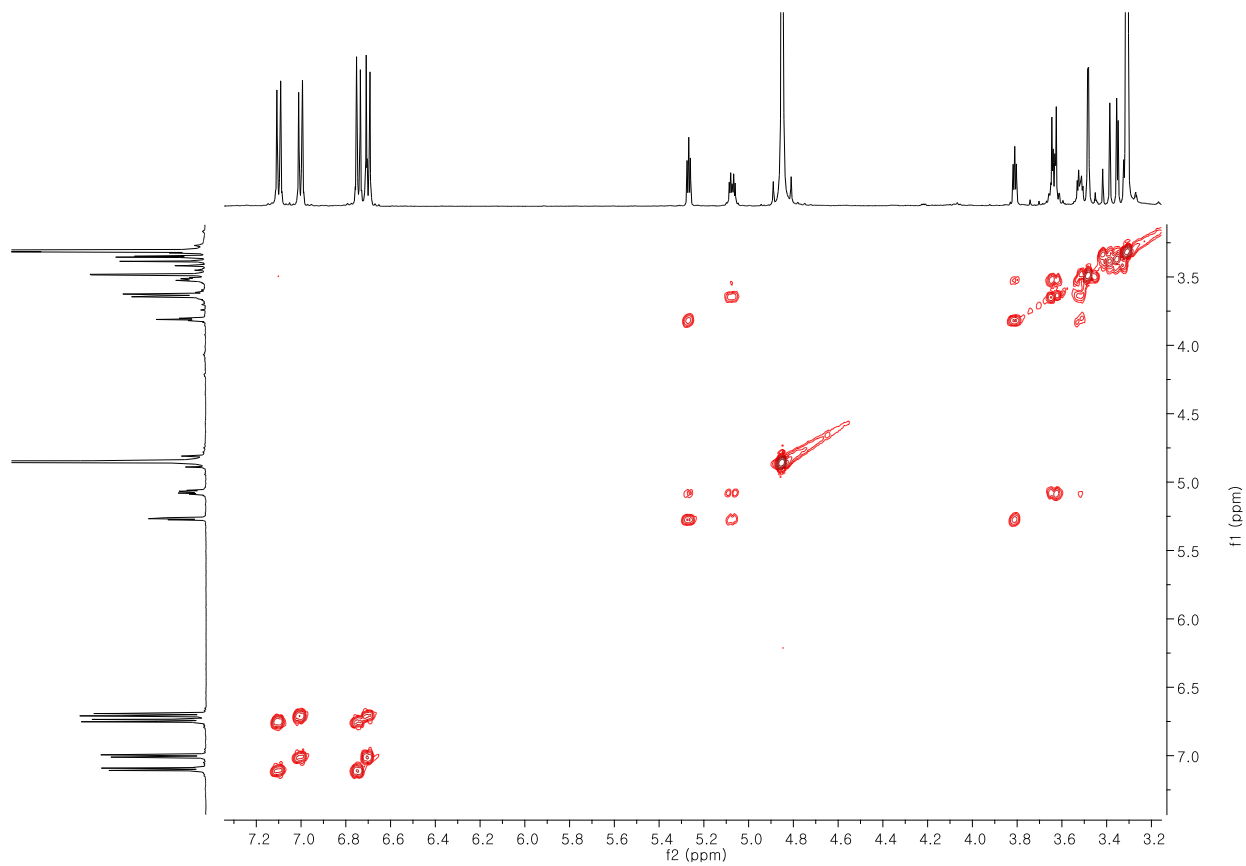


Fig. S38. ^1H - ^1H COSY spectrum of compound **7**

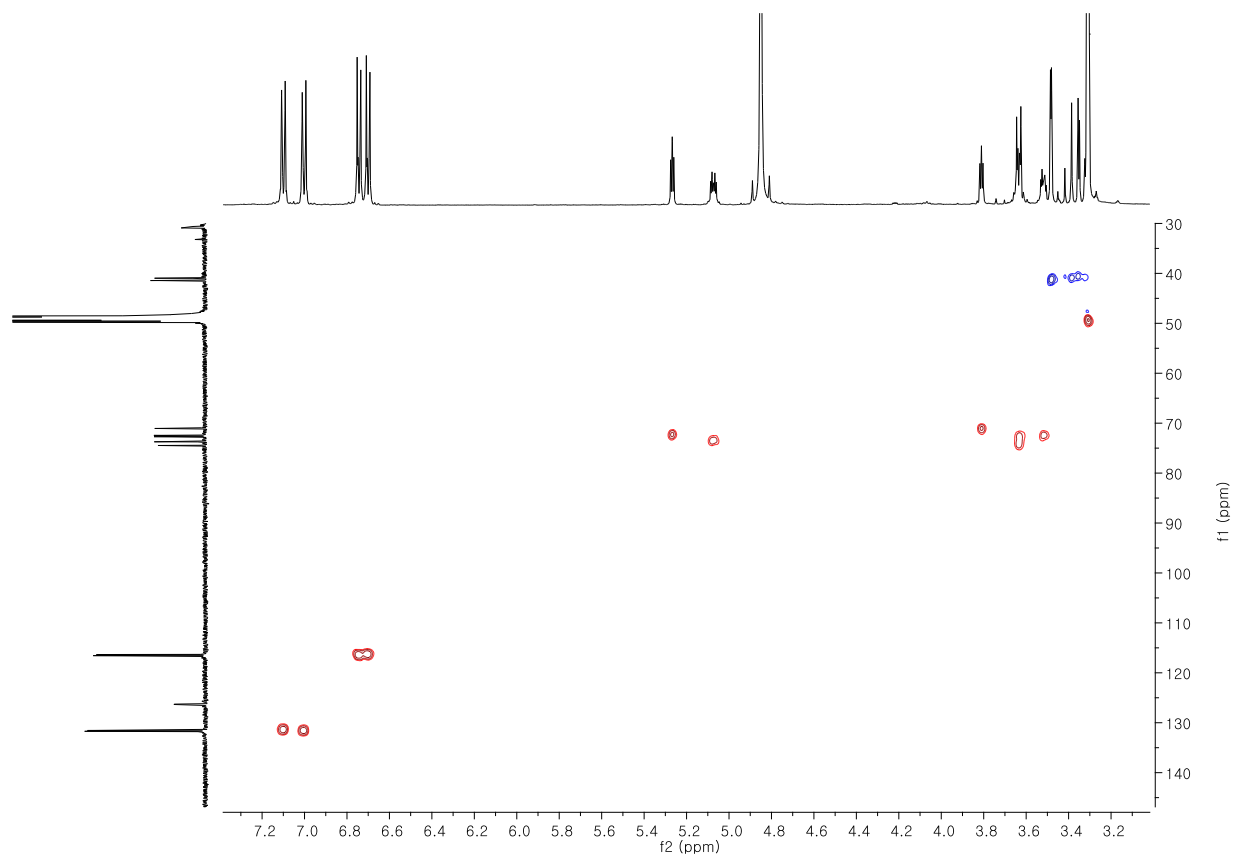


Fig. S39. HSQC spectrum of compound **7**

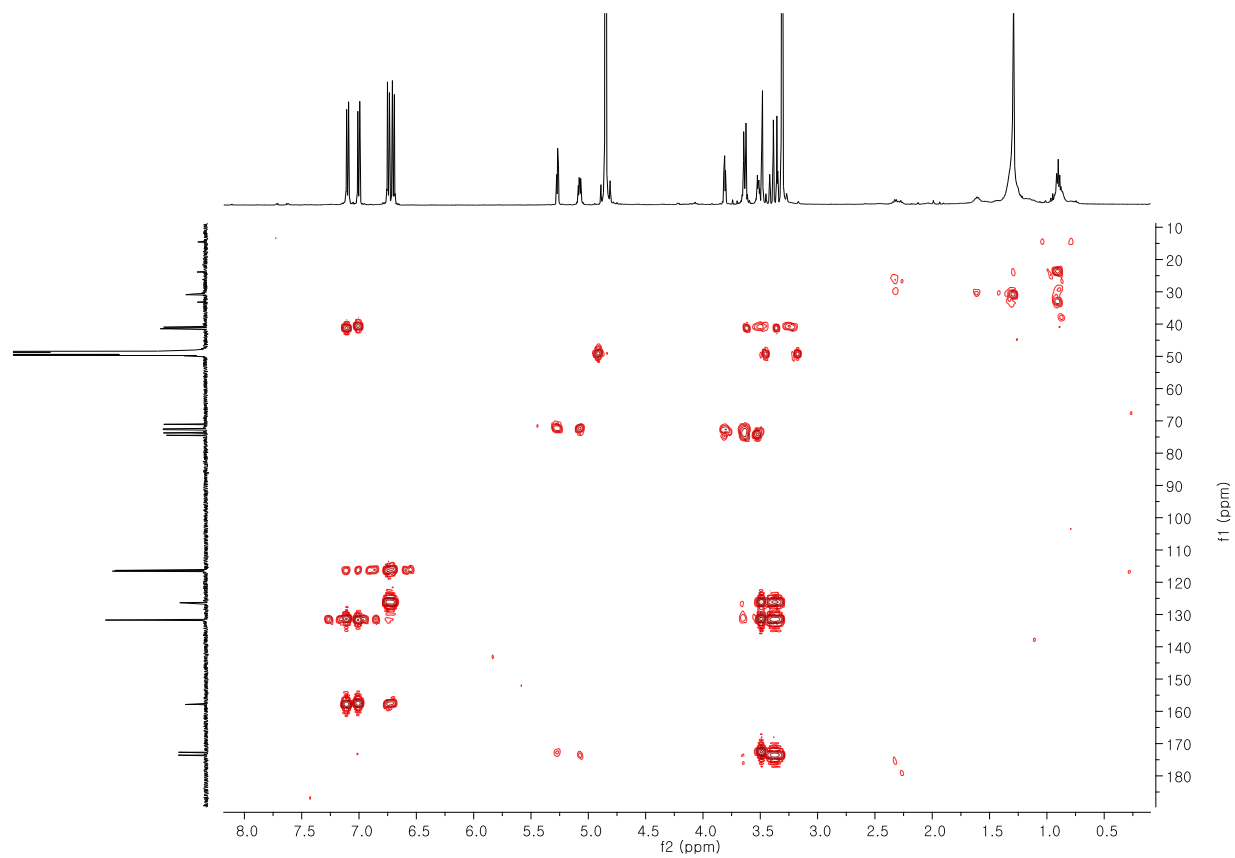


Fig. S40. HMBC spectrum of compound **7**

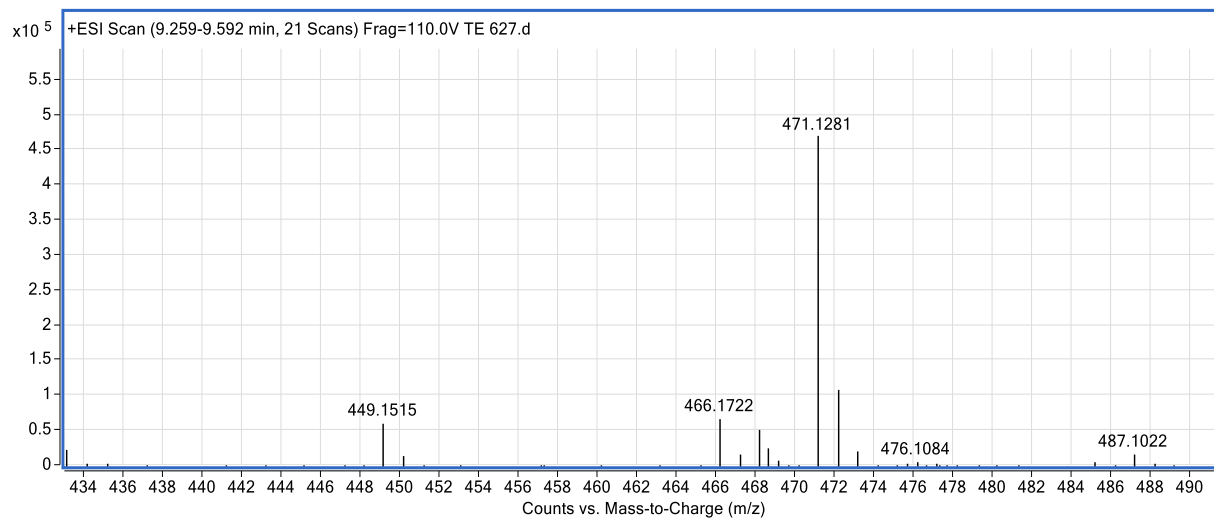


Fig. S41. MS spectrum of compound **7**

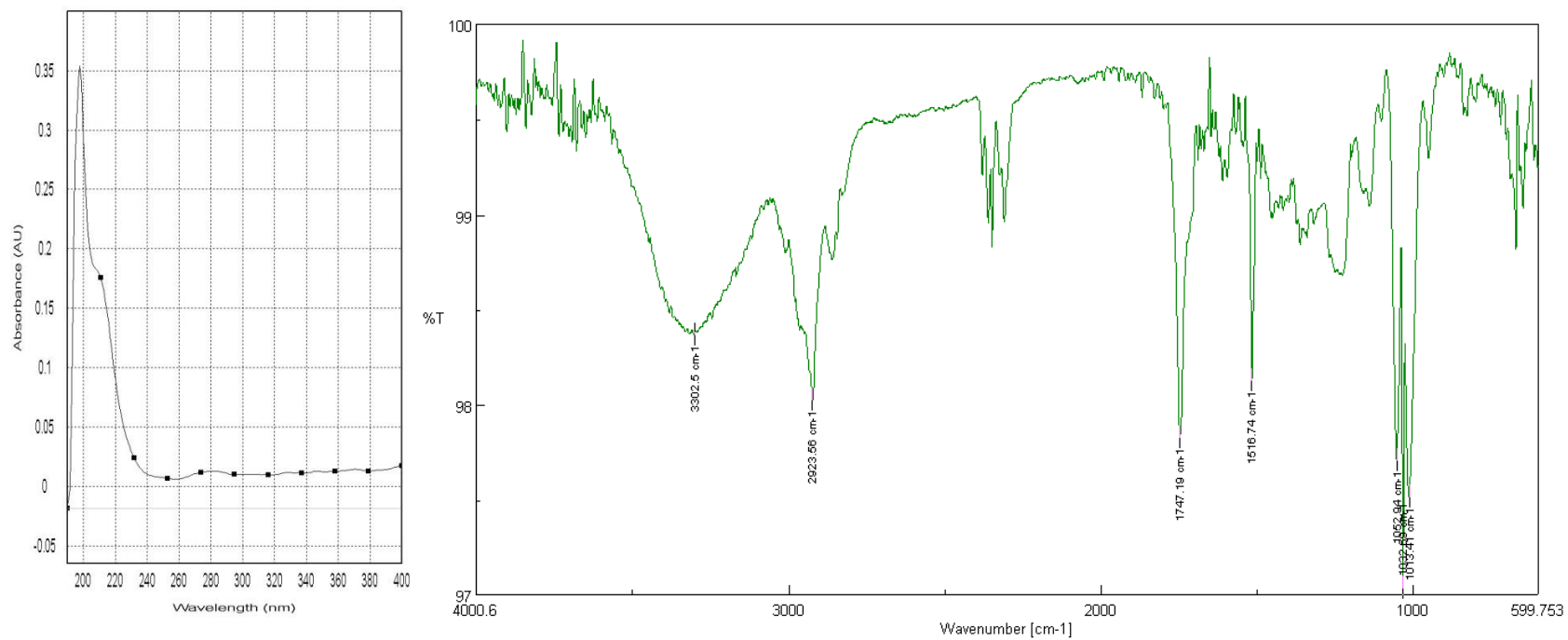


Fig. S42. UV, IR spectra of compound **7**

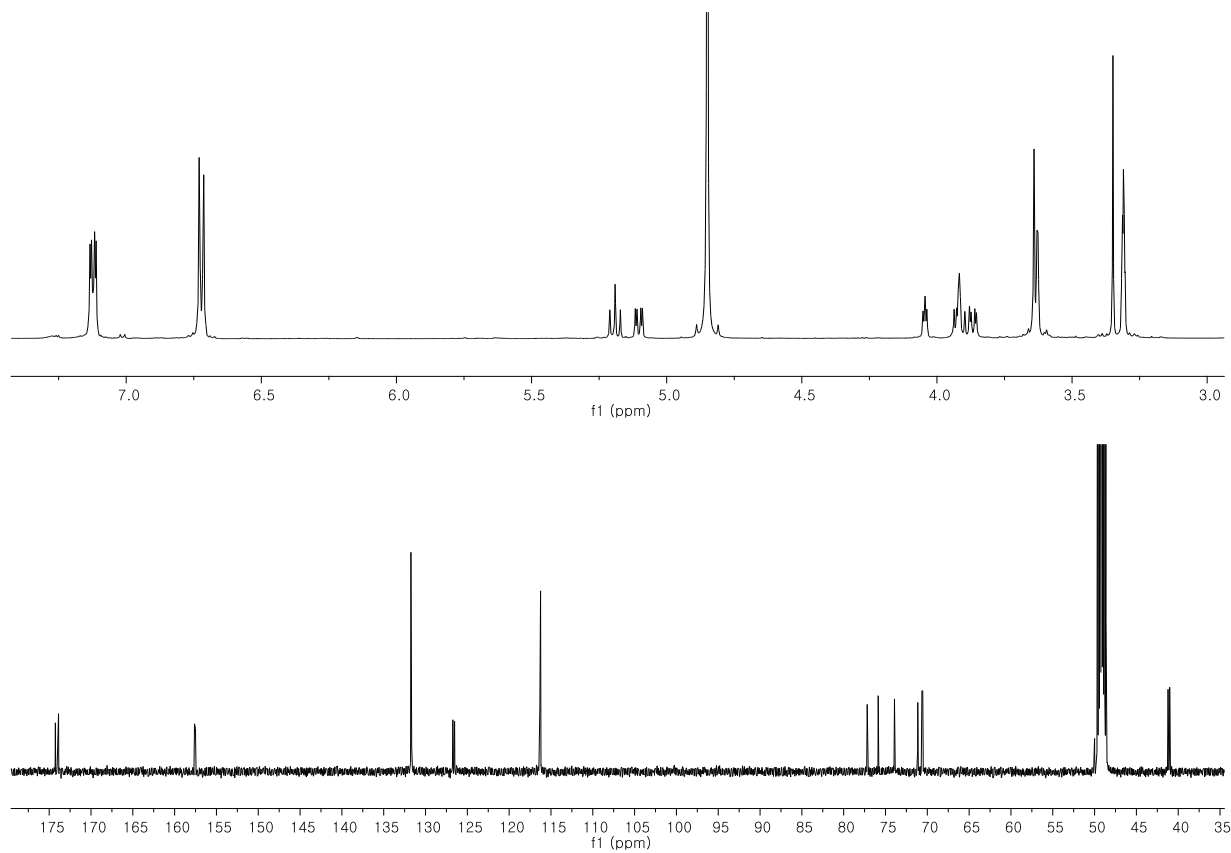
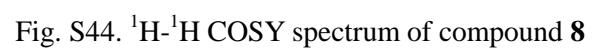


Fig. S43. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **8**



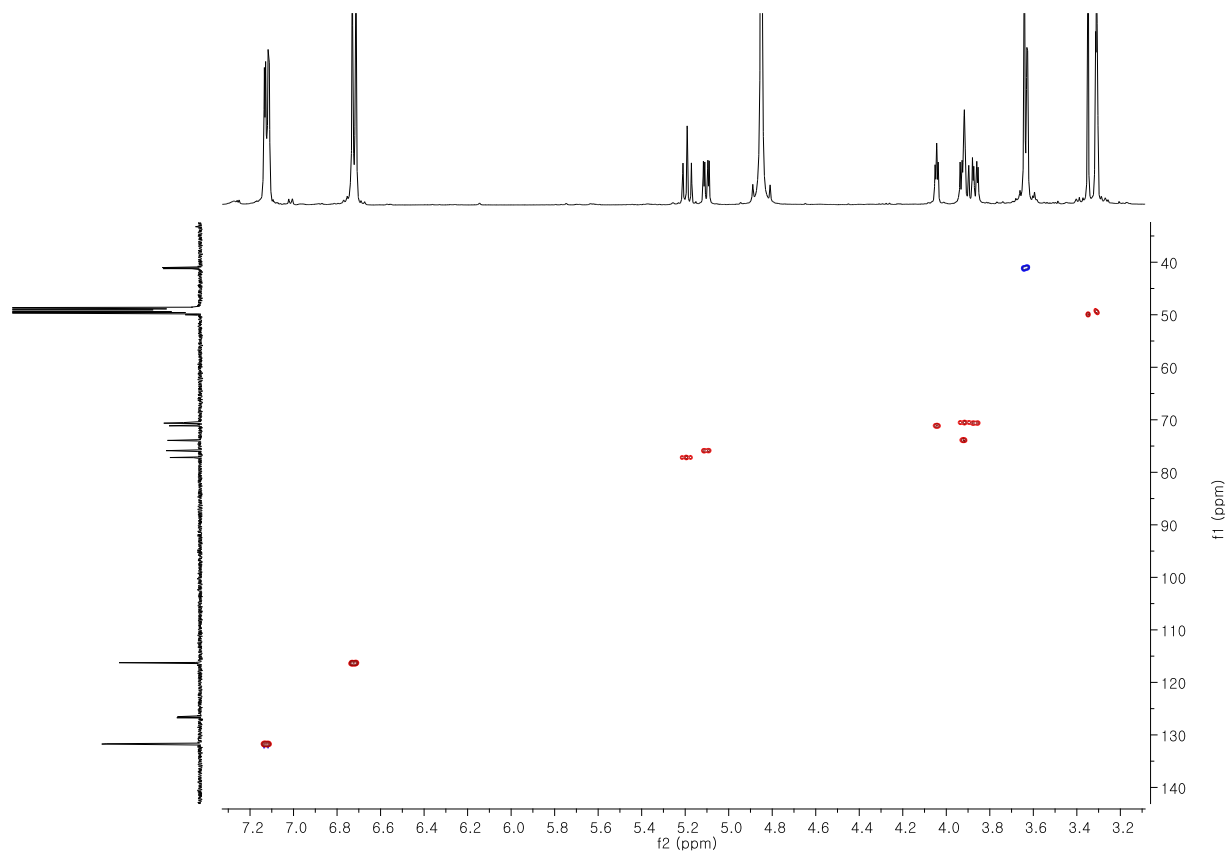


Fig. S45. HSQC spectrum of compound **8**

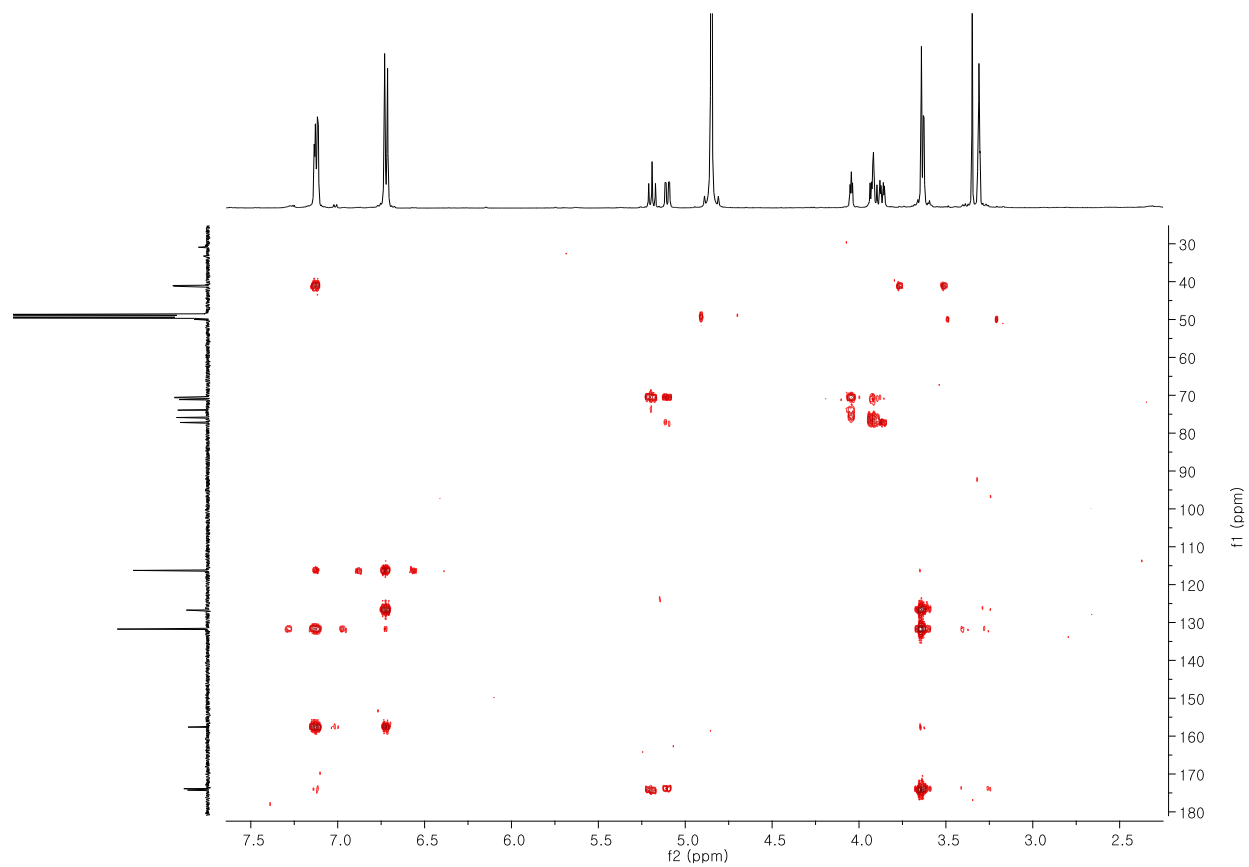


Fig. S46. HMBC spectrum of compound **8**

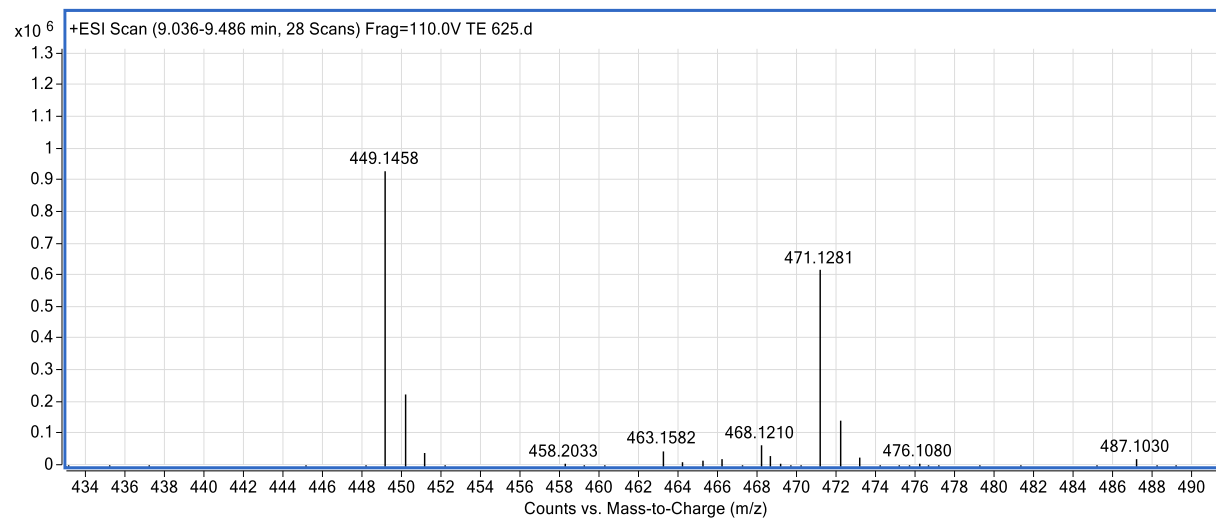


Fig. S47. MS spectrum of compound **8**

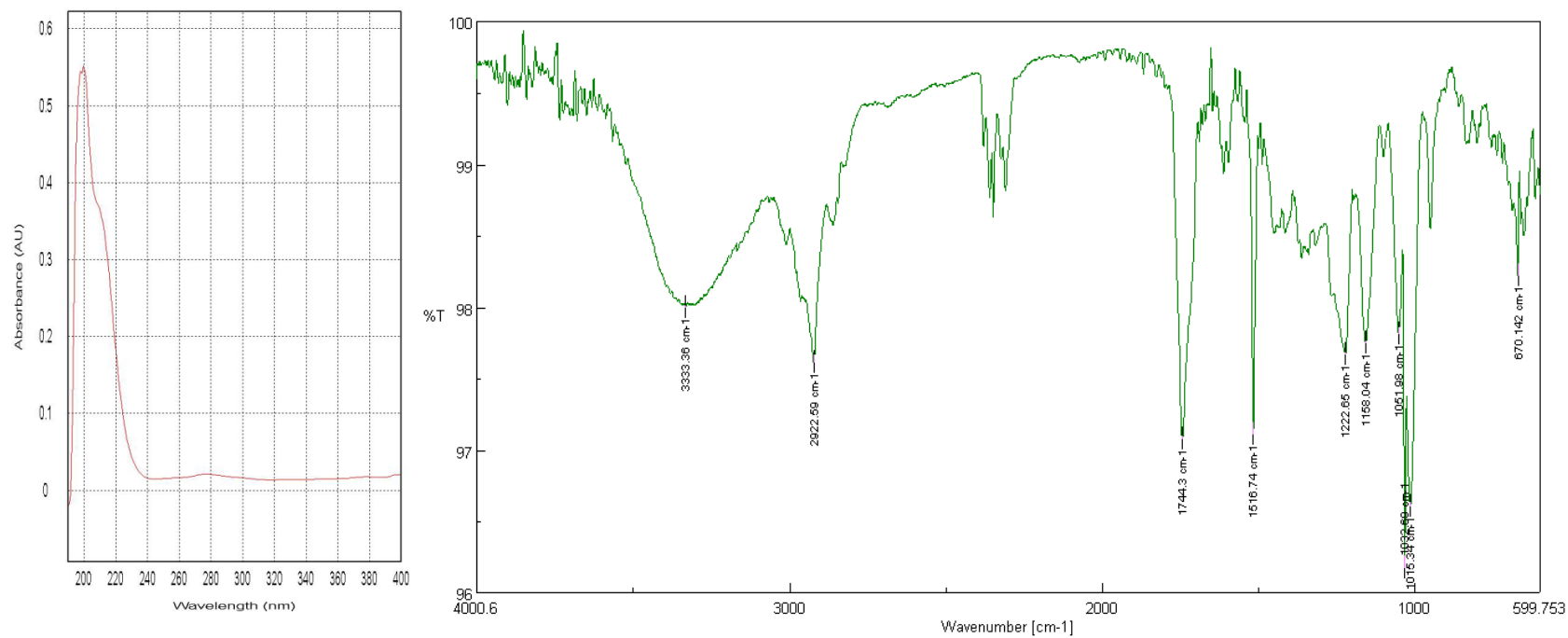


Fig. S48. UV, IR spectra of compound **8**

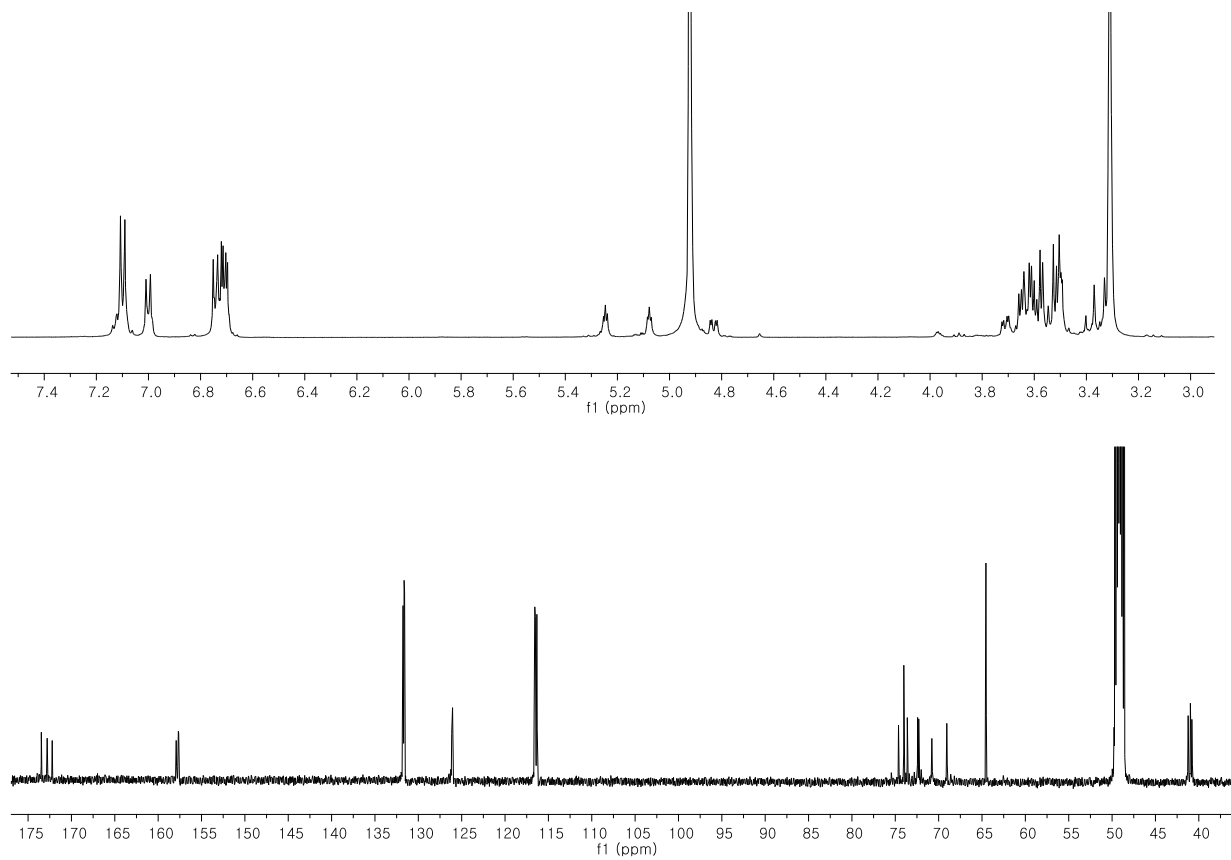


Fig. S49. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **9**

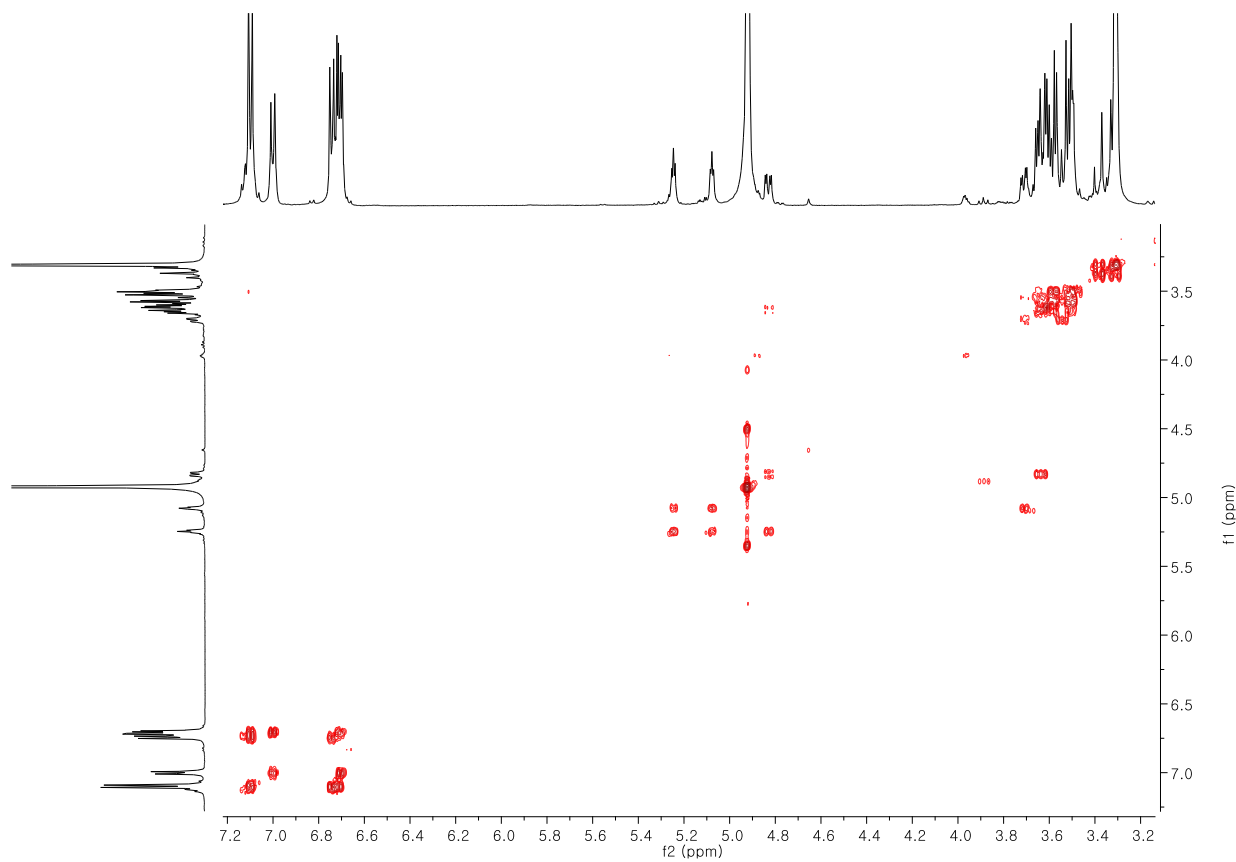


Fig. S50. ^1H - ^1H COSY spectrum of compound **9**

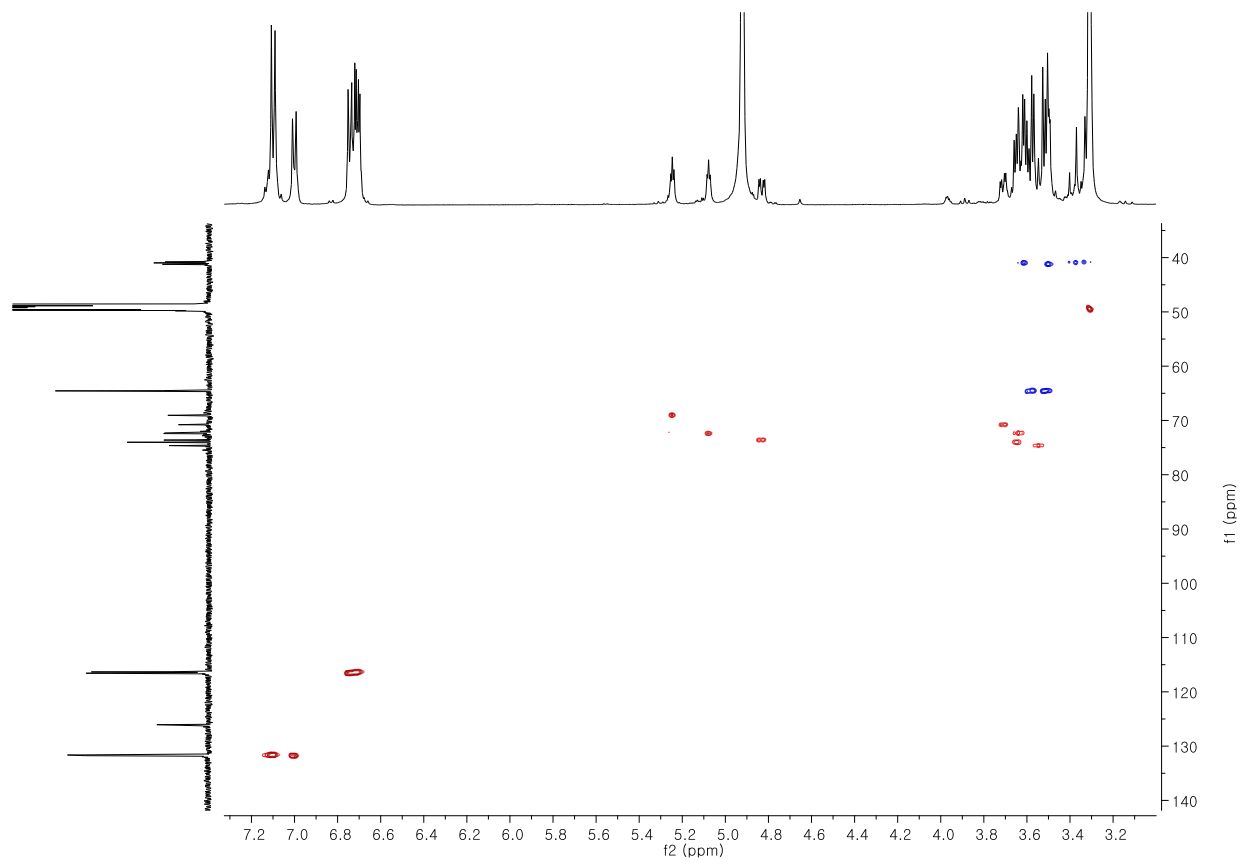


Fig. S51. HSQC spectrum of compound **9**

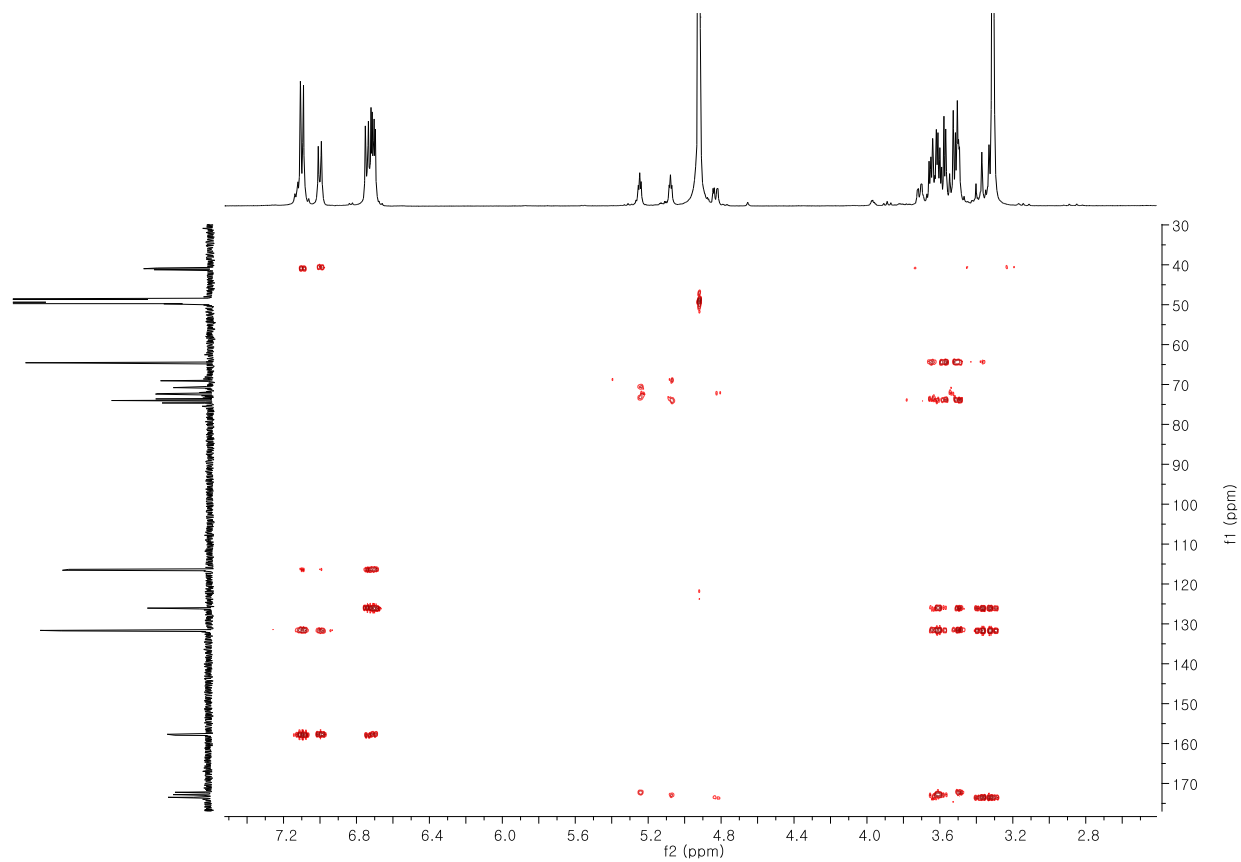


Fig. S52. HMBC spectrum of compound **9**

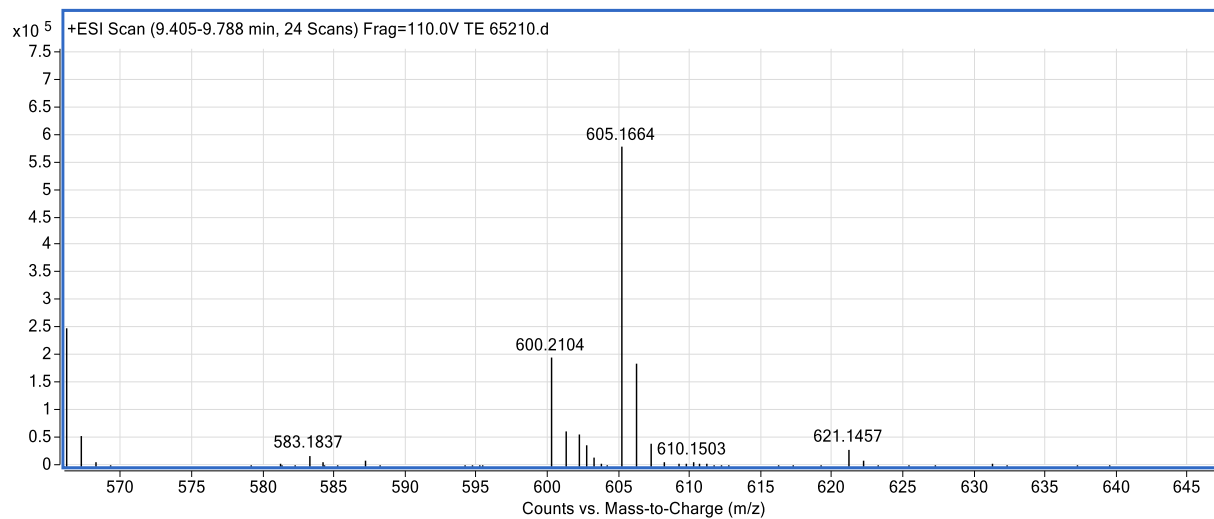


Fig. S53. MS spectrum of compound **9**

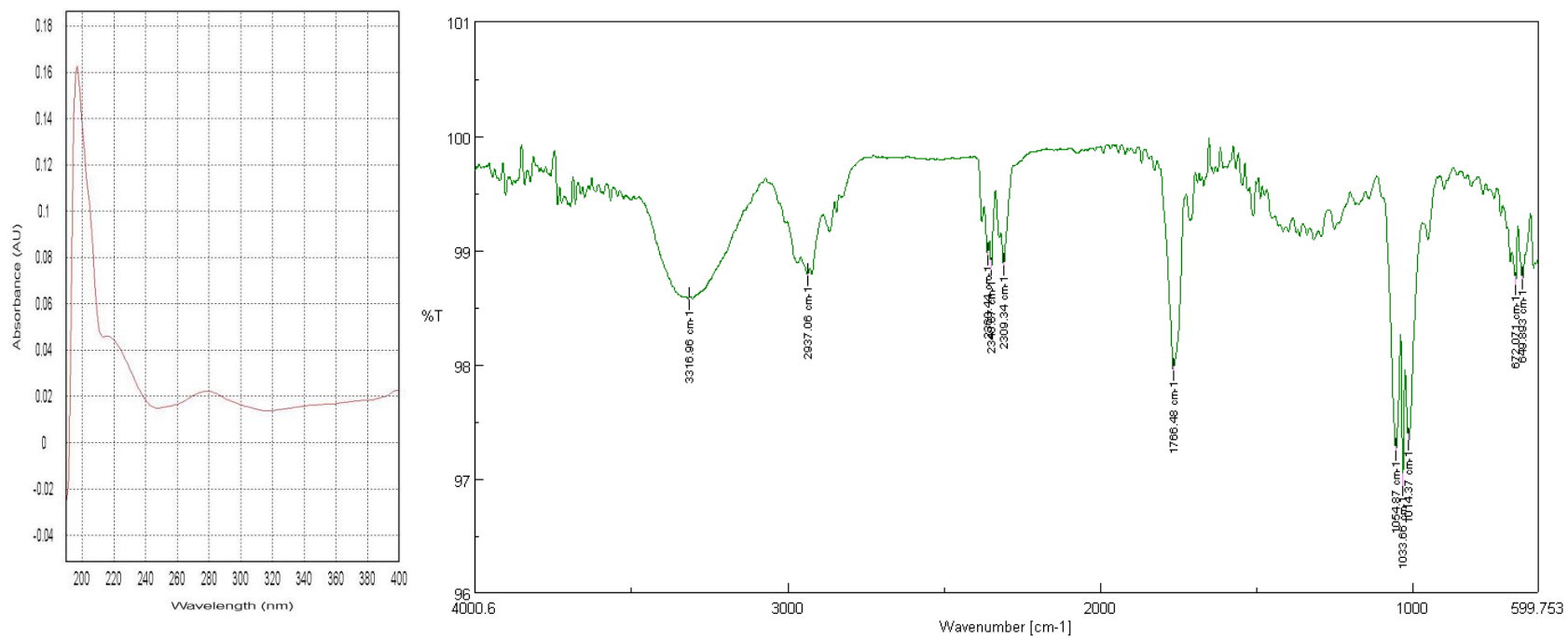


Fig. S54. UV, IR spectra of compound **9**

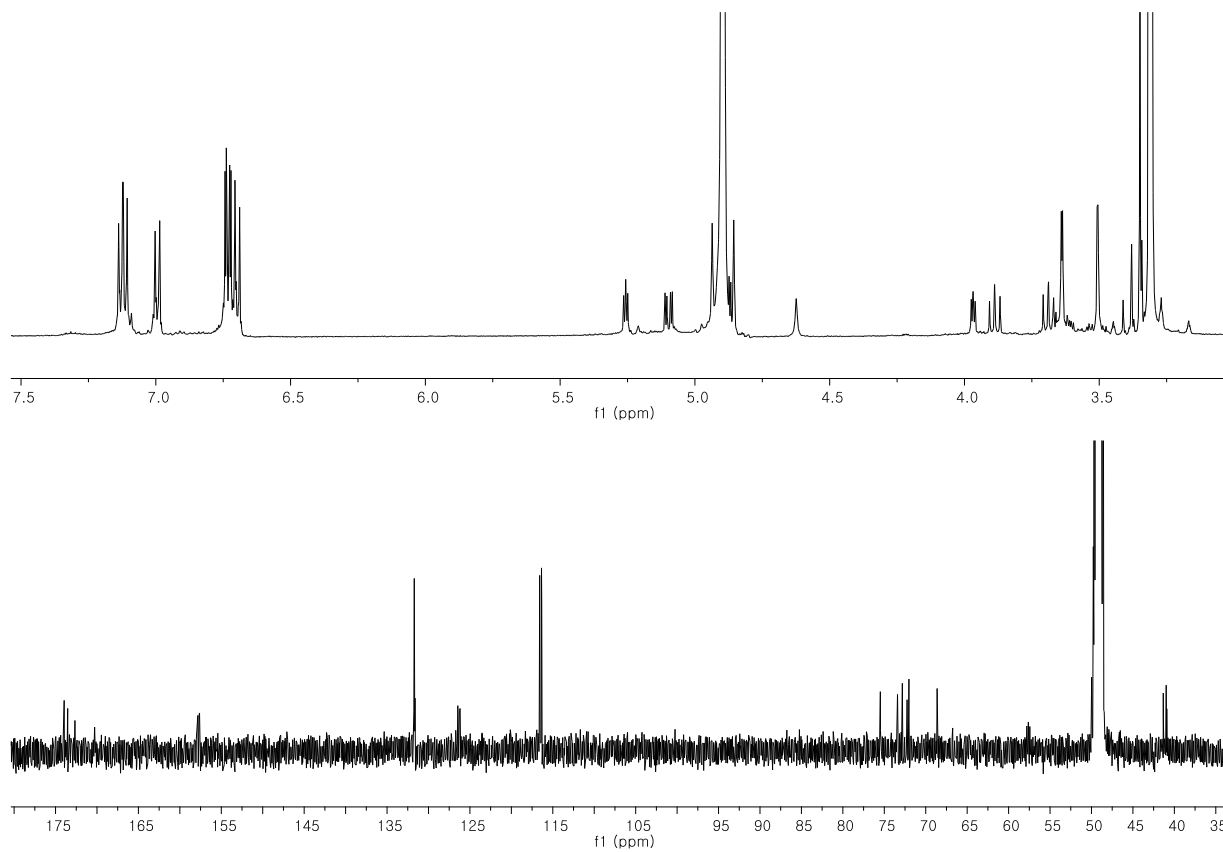


Fig. S55. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **10**

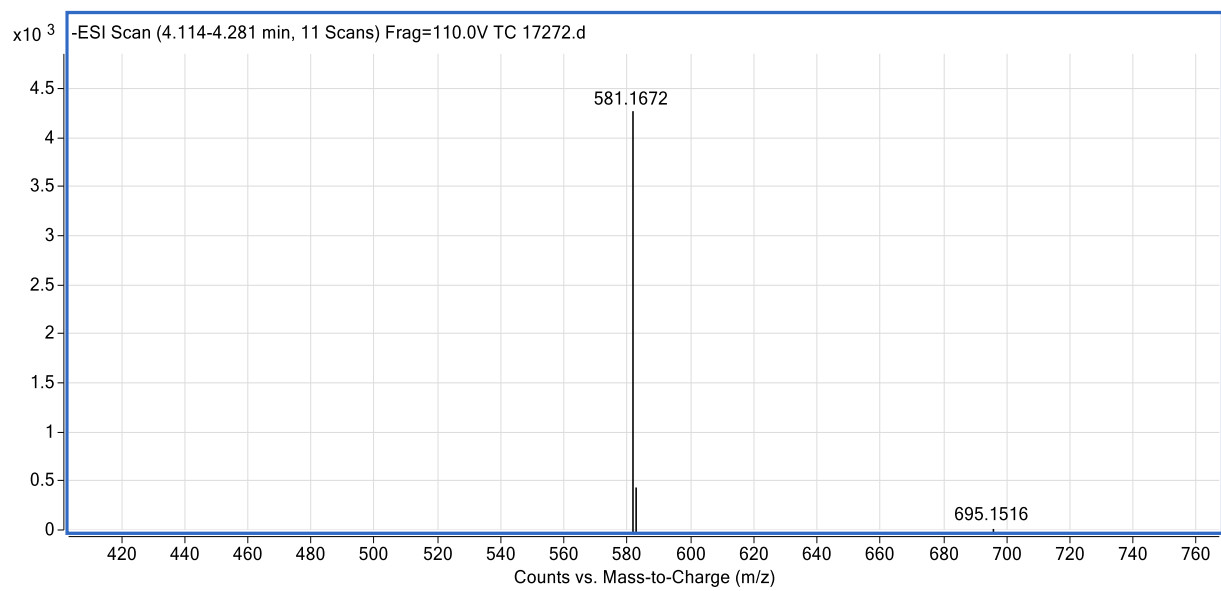


Fig. S56. MS spectrum of compound **10**

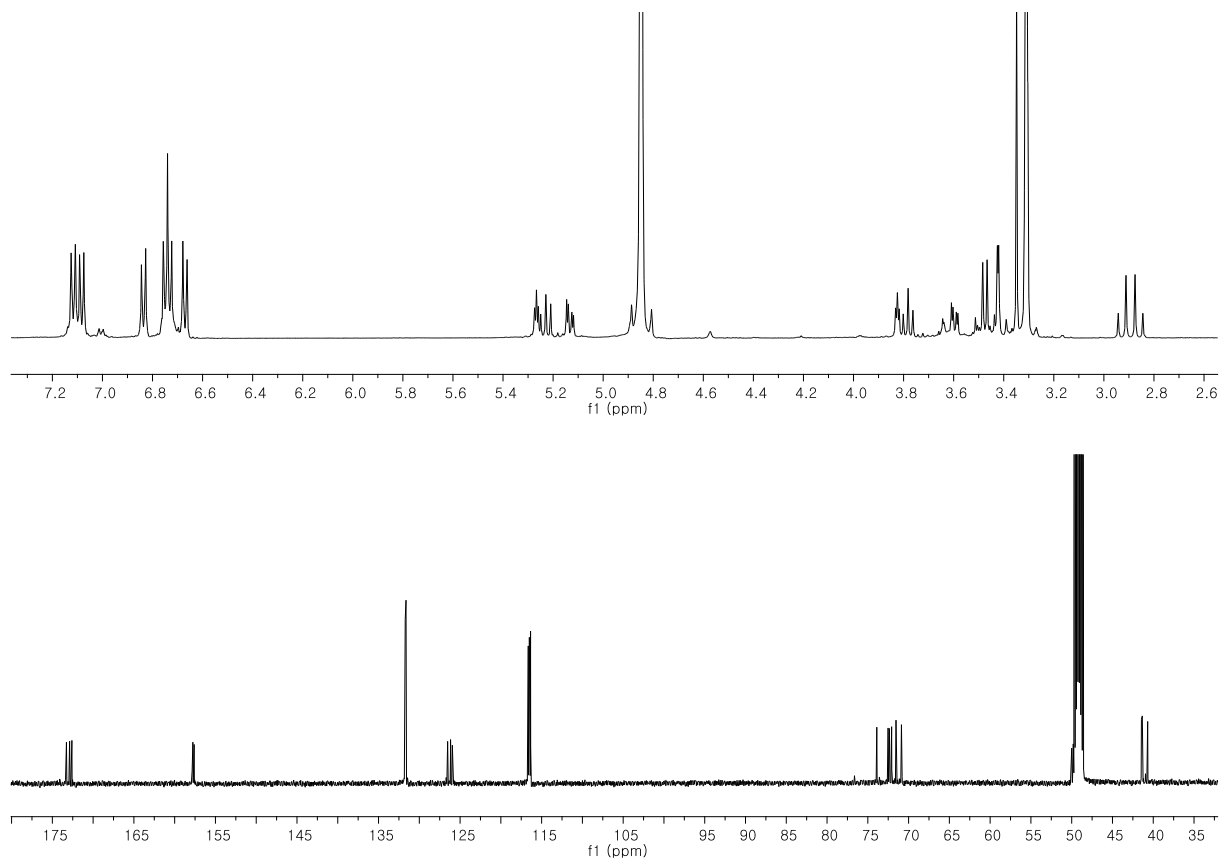


Fig. S57. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **11**

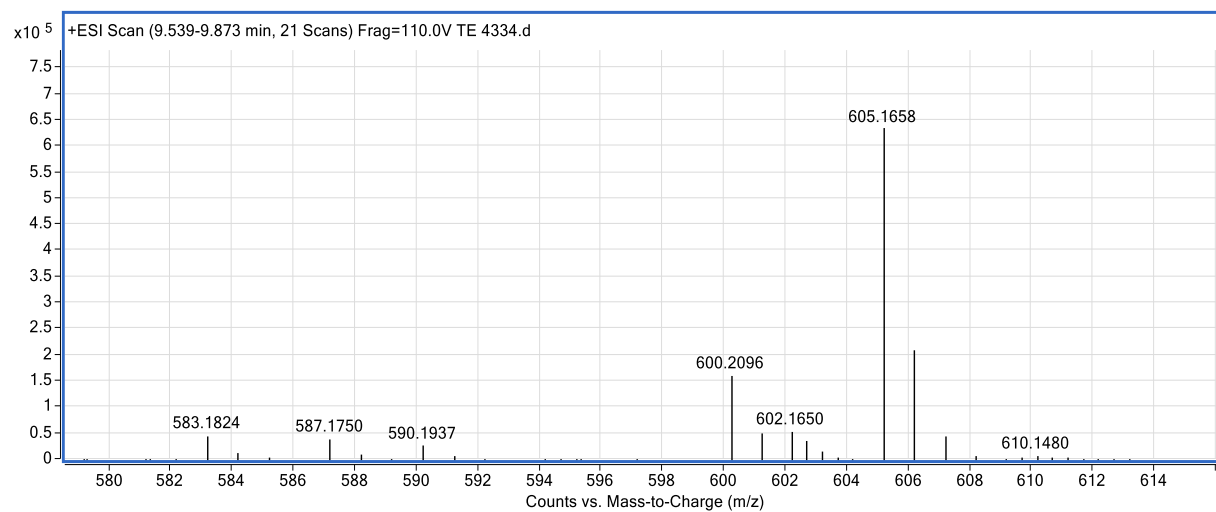


Fig. S58. MS spectrum of compound **11**

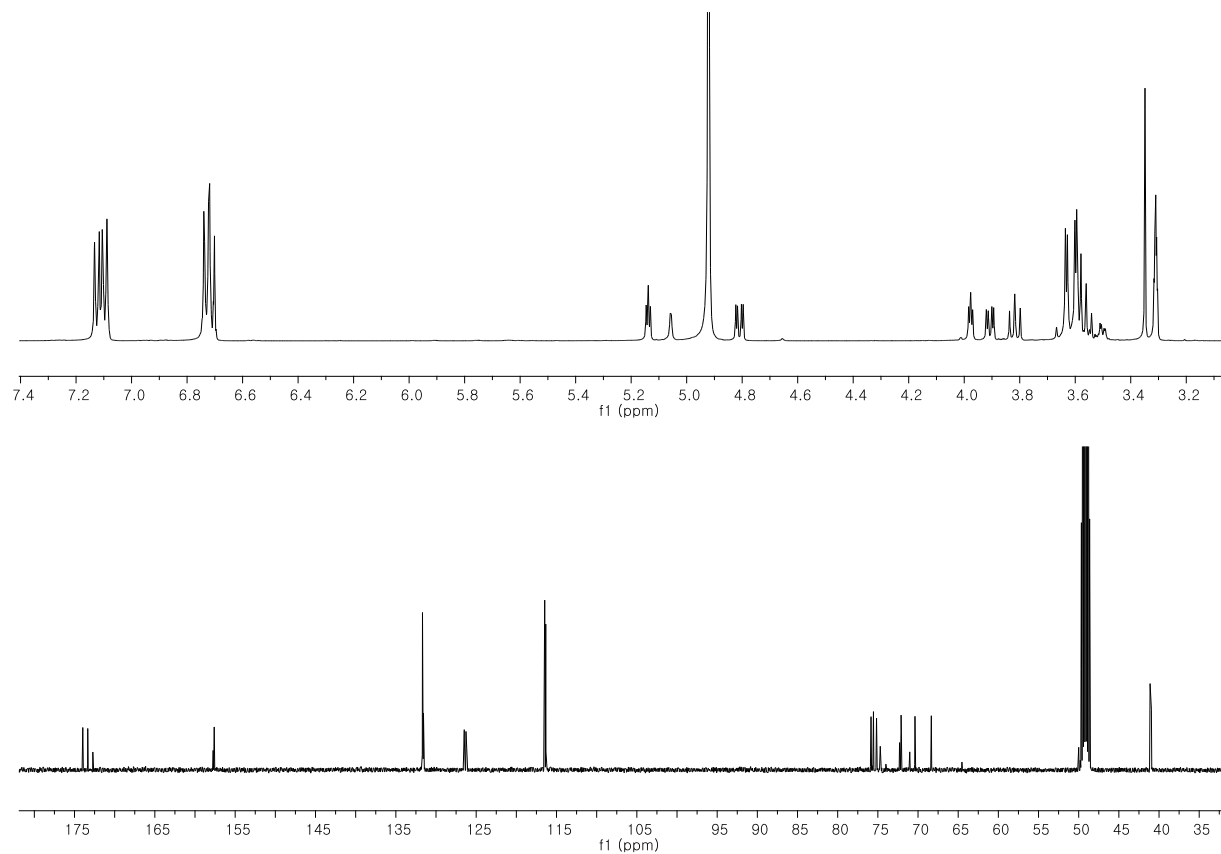


Fig. S59. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **12**

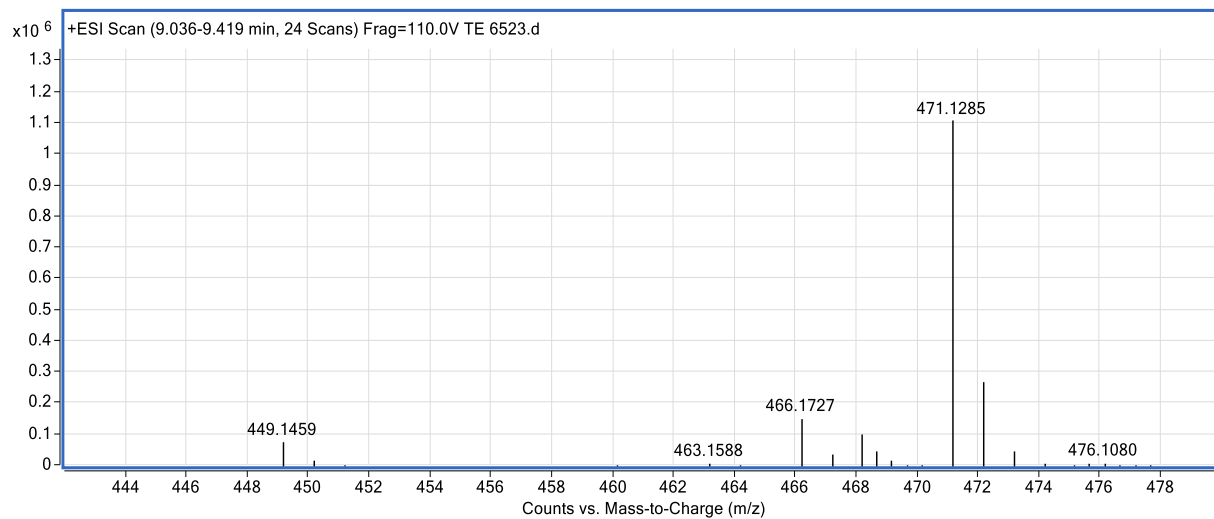


Fig. S60. MS spectrum of compound **12**

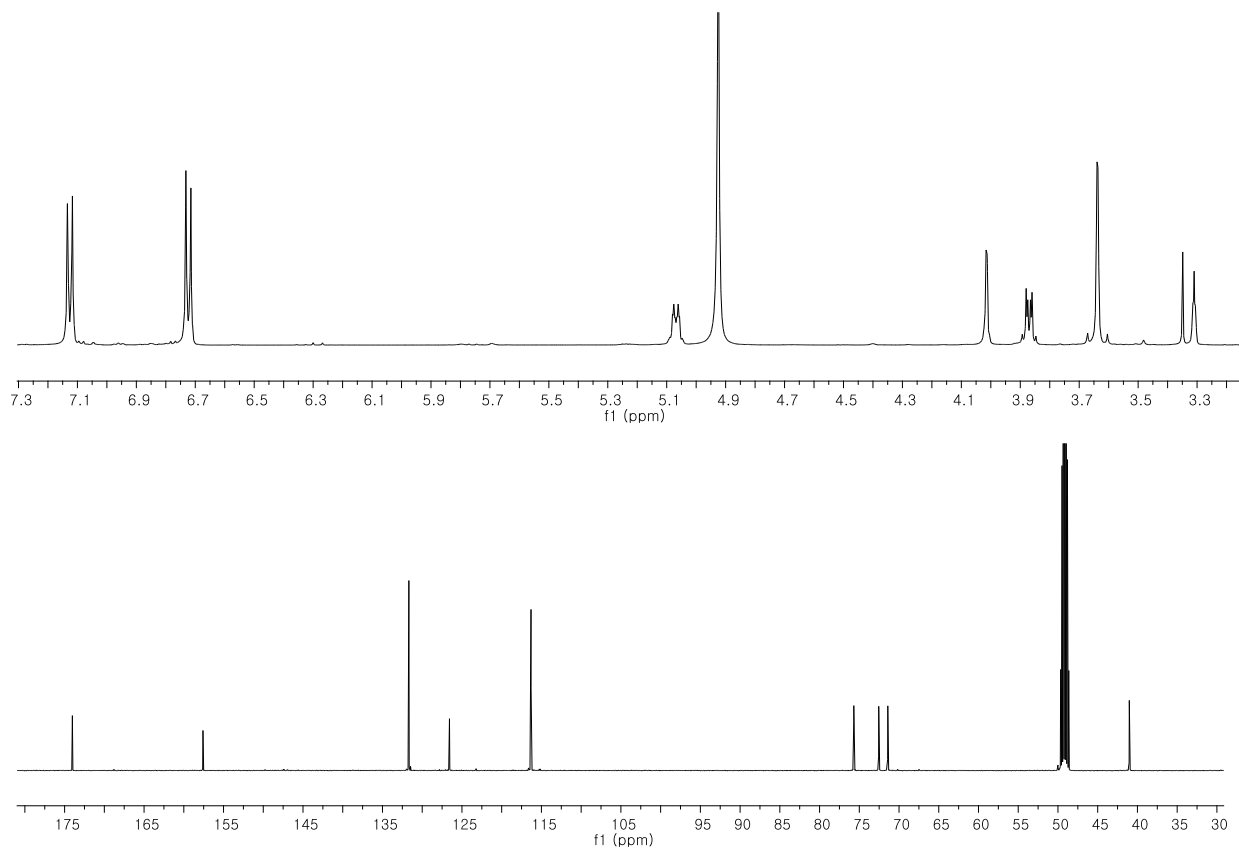


Fig. S61. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **13**

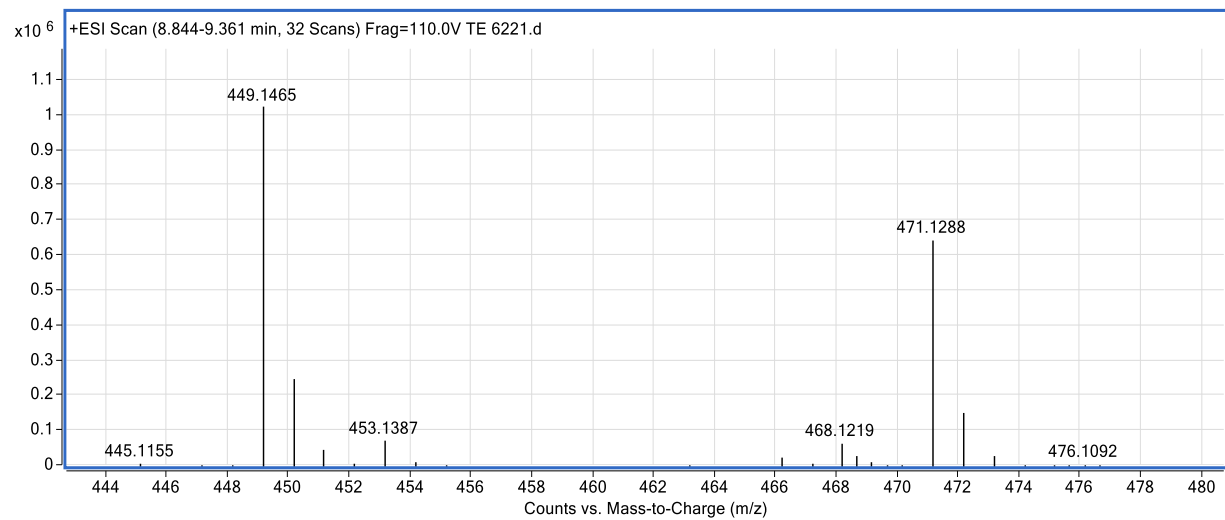


Fig. S62. MS spectrum of compound **13**

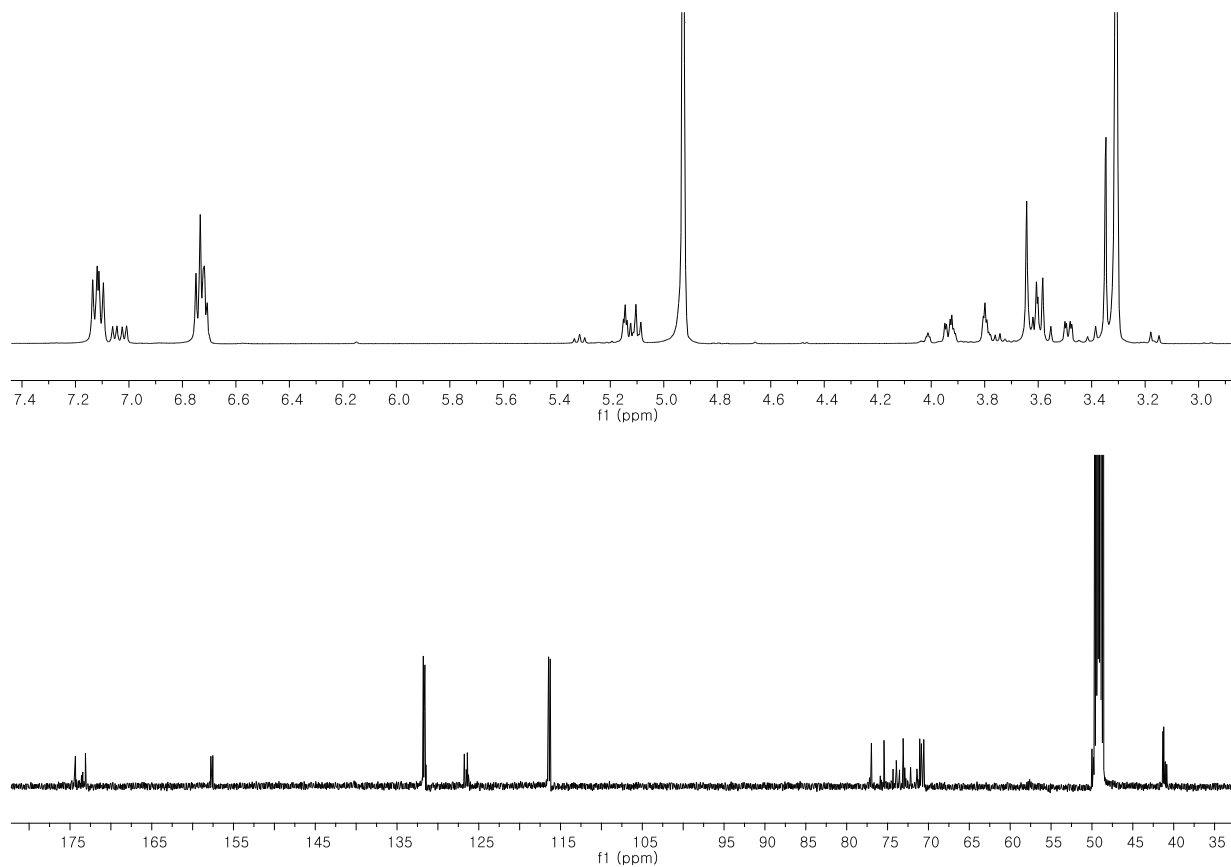


Fig. S63. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **14**

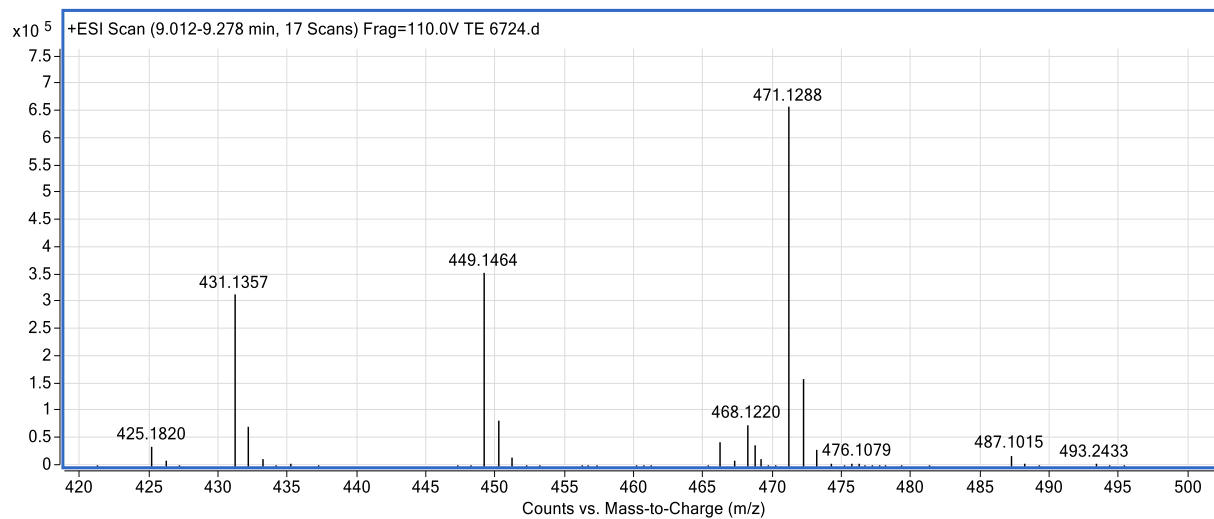


Fig. S64. MS spectrum of compound **14**

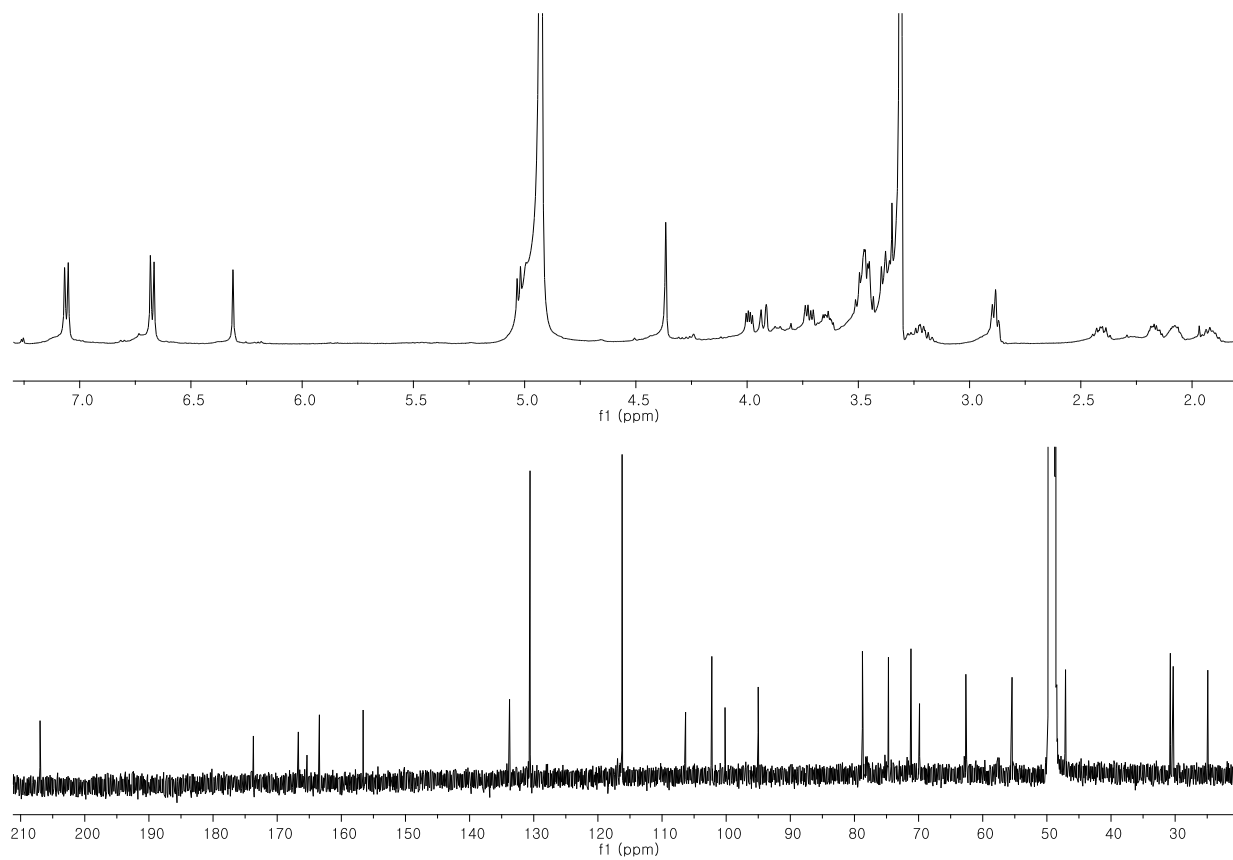


Fig. S65. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **15**

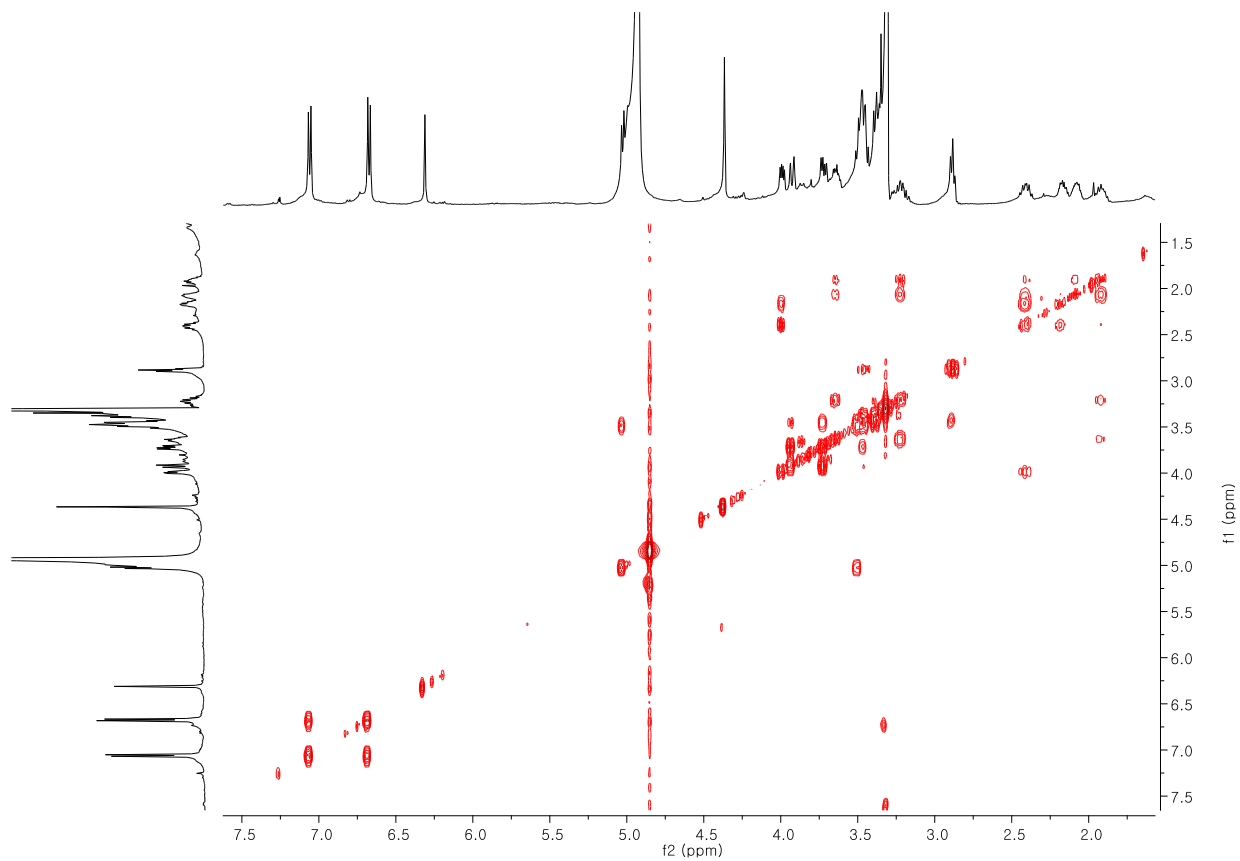


Fig. S66. ^1H - ^1H COSY spectrum of compound **15**

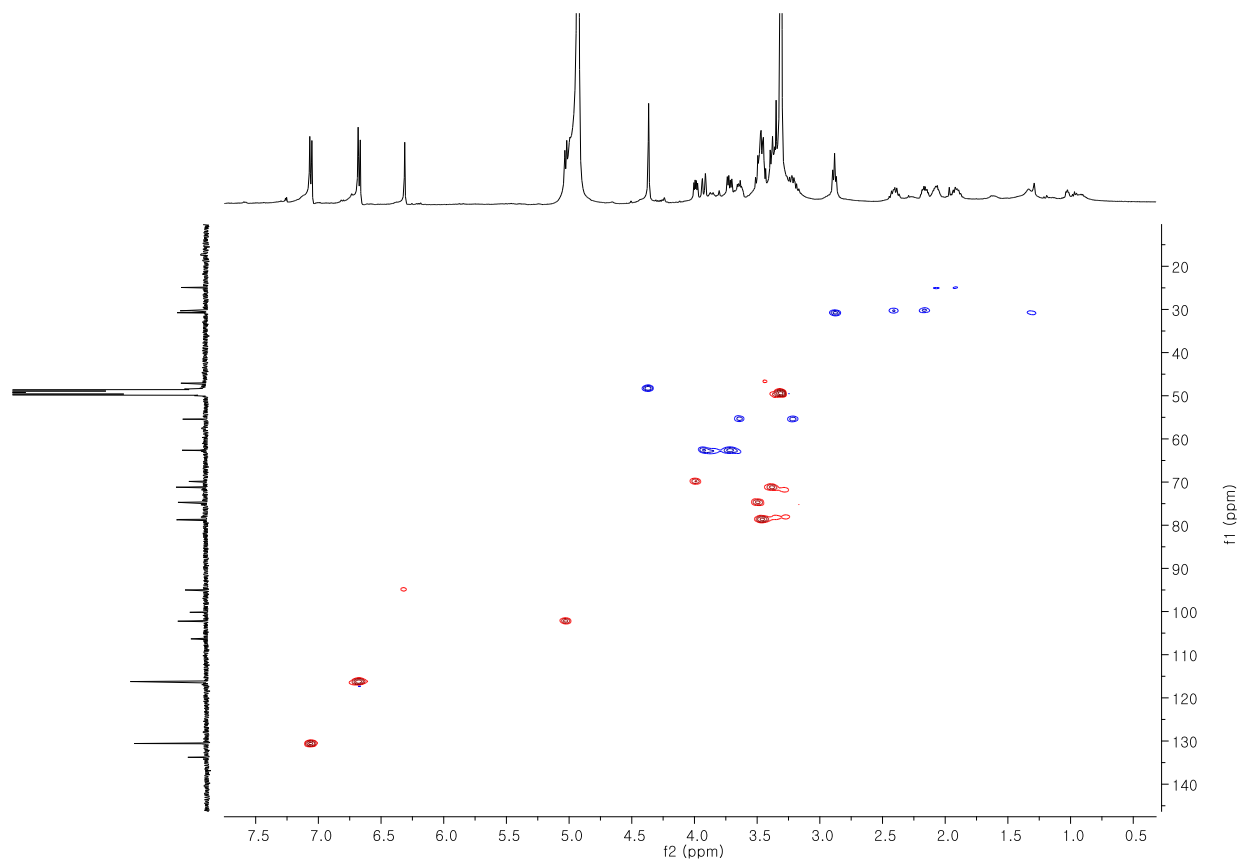


Fig. S67. HSQC spectrum of compound **15**

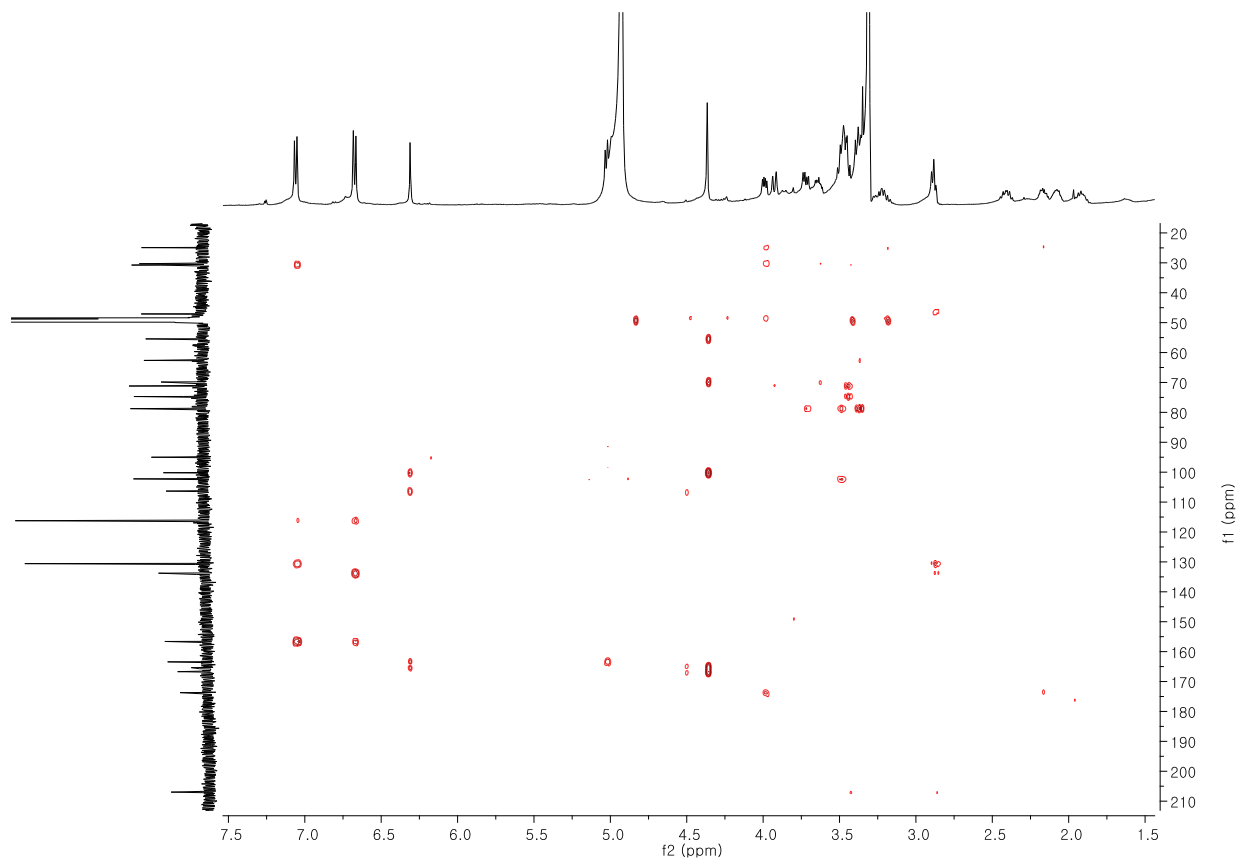


Fig. S68. HMBC spectrum of compound **15**

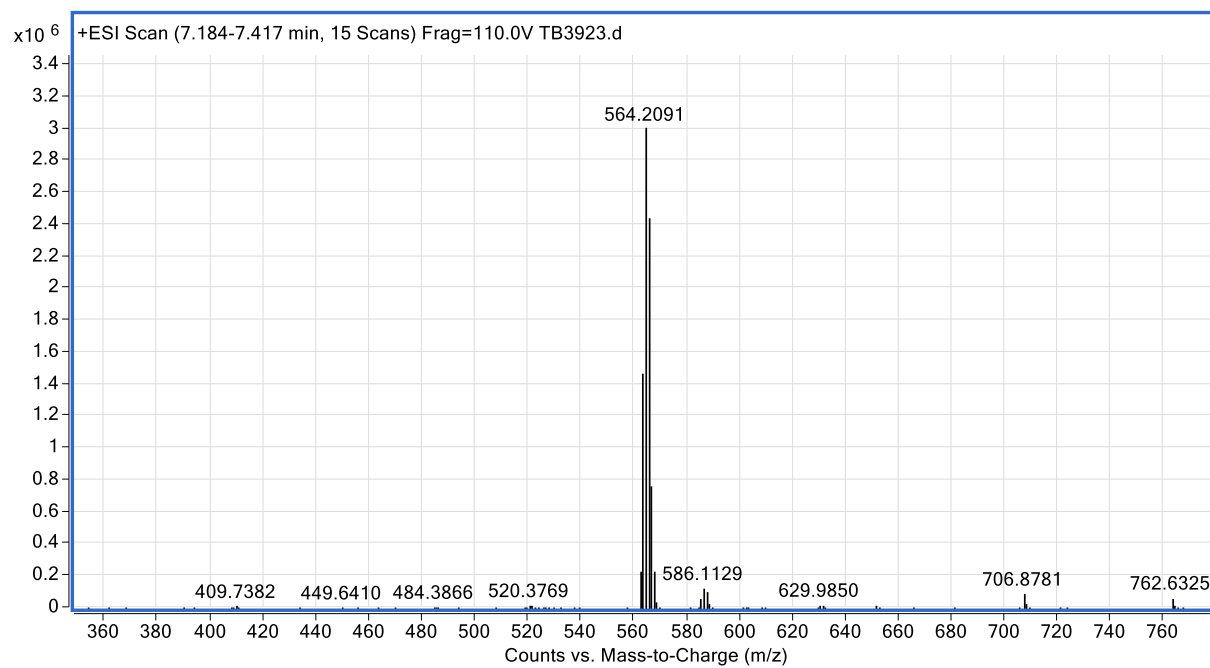


Fig. S69. MS spectrum of compound **15**

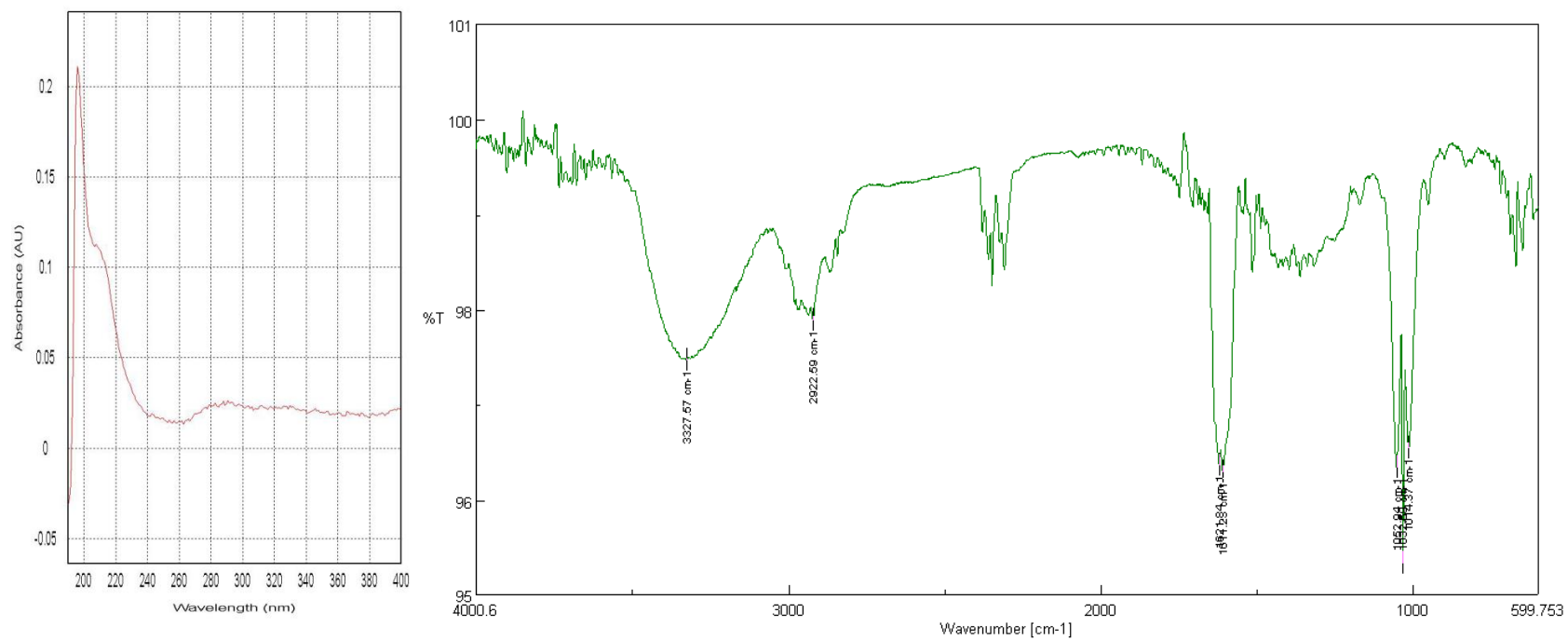


Fig. S70. UV, IR spectra of compound **15**

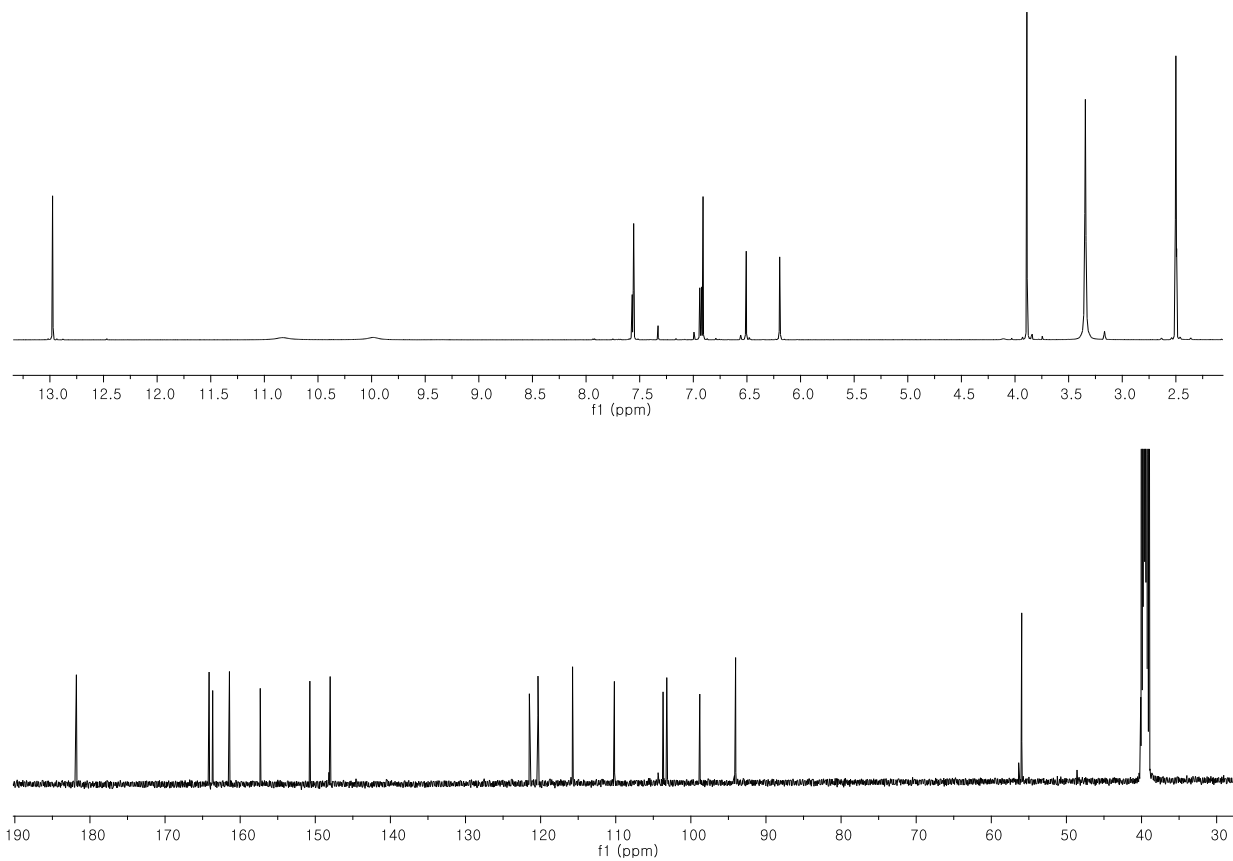


Fig. S71. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **16**

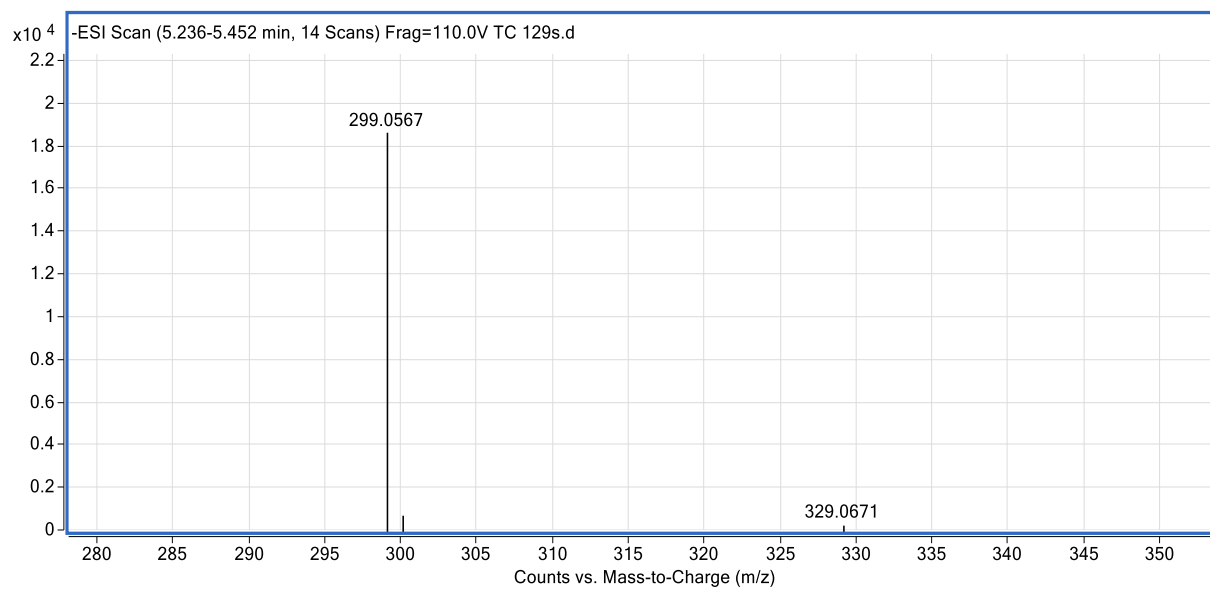


Fig. S72. MS spectrum of compound **16**

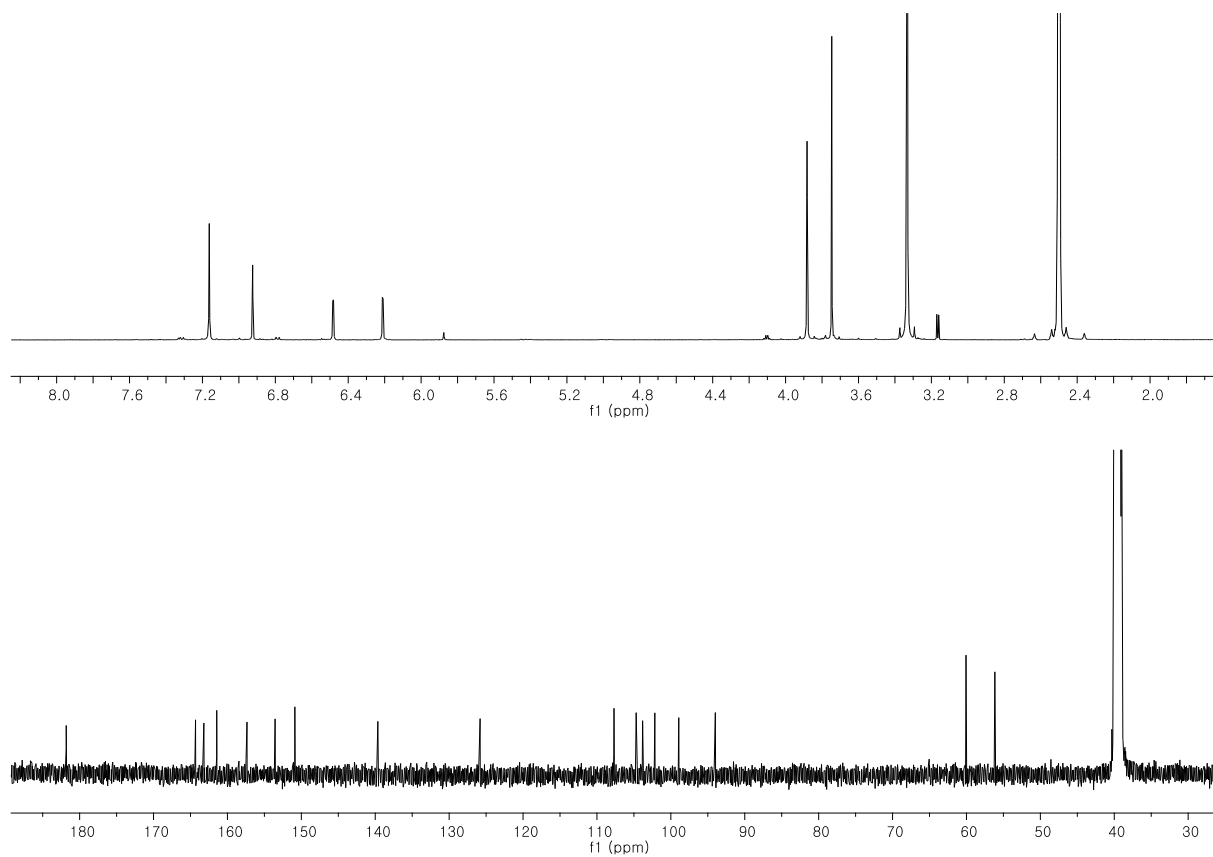


Fig. S73. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **17**

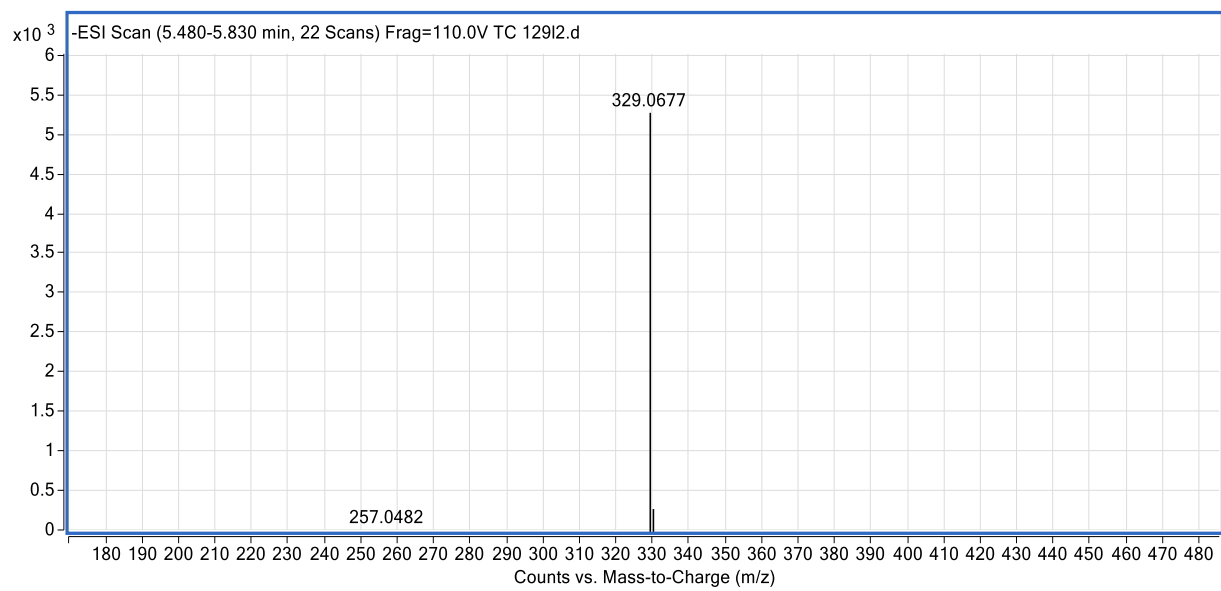


Fig. S74. MS spectrum of compound **17**

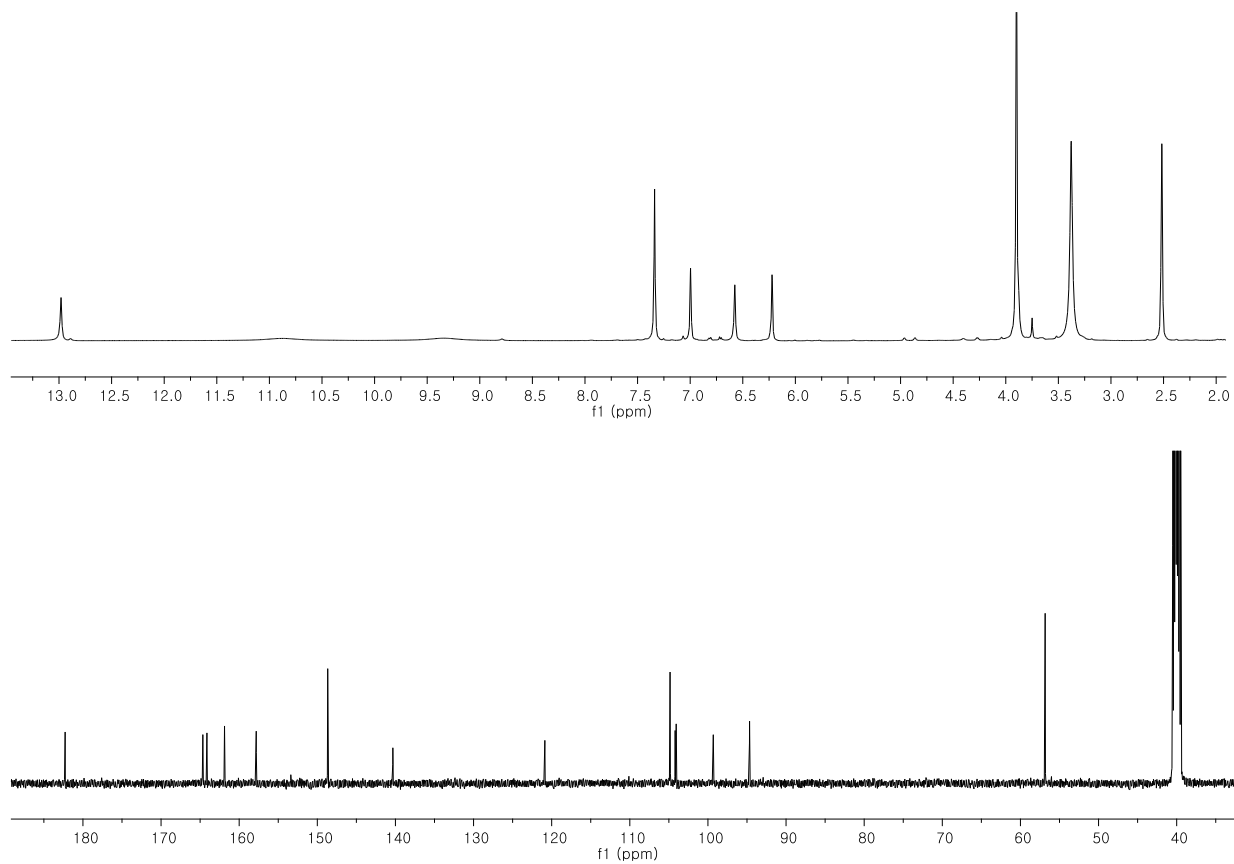


Fig. S75. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **18**

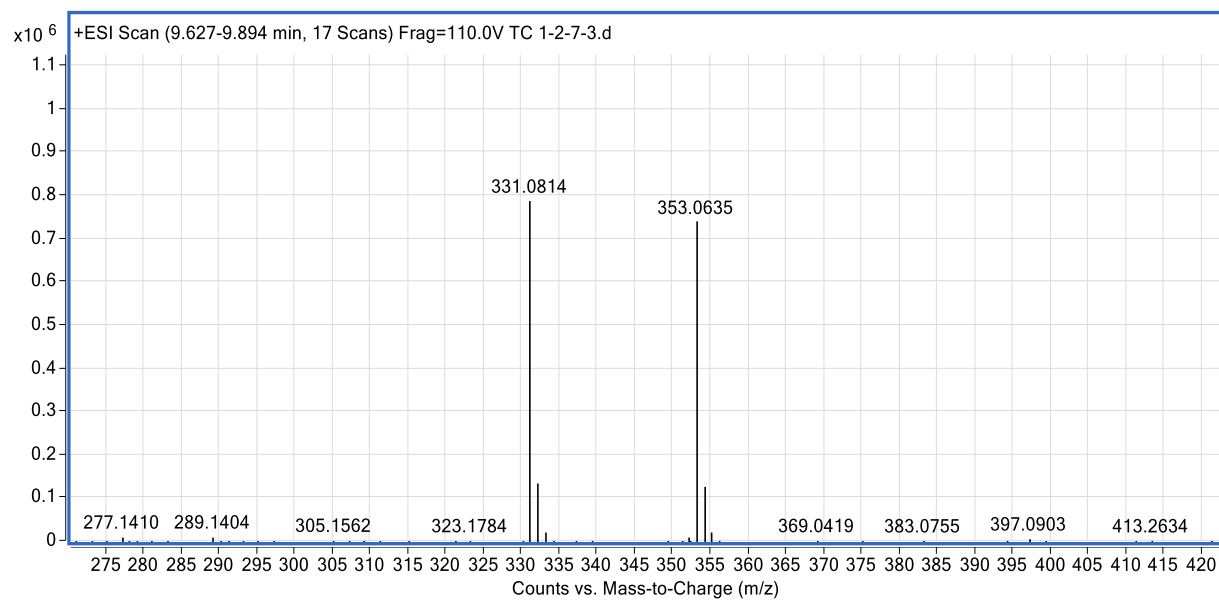


Fig. S76. MS spectrum of compound **18**

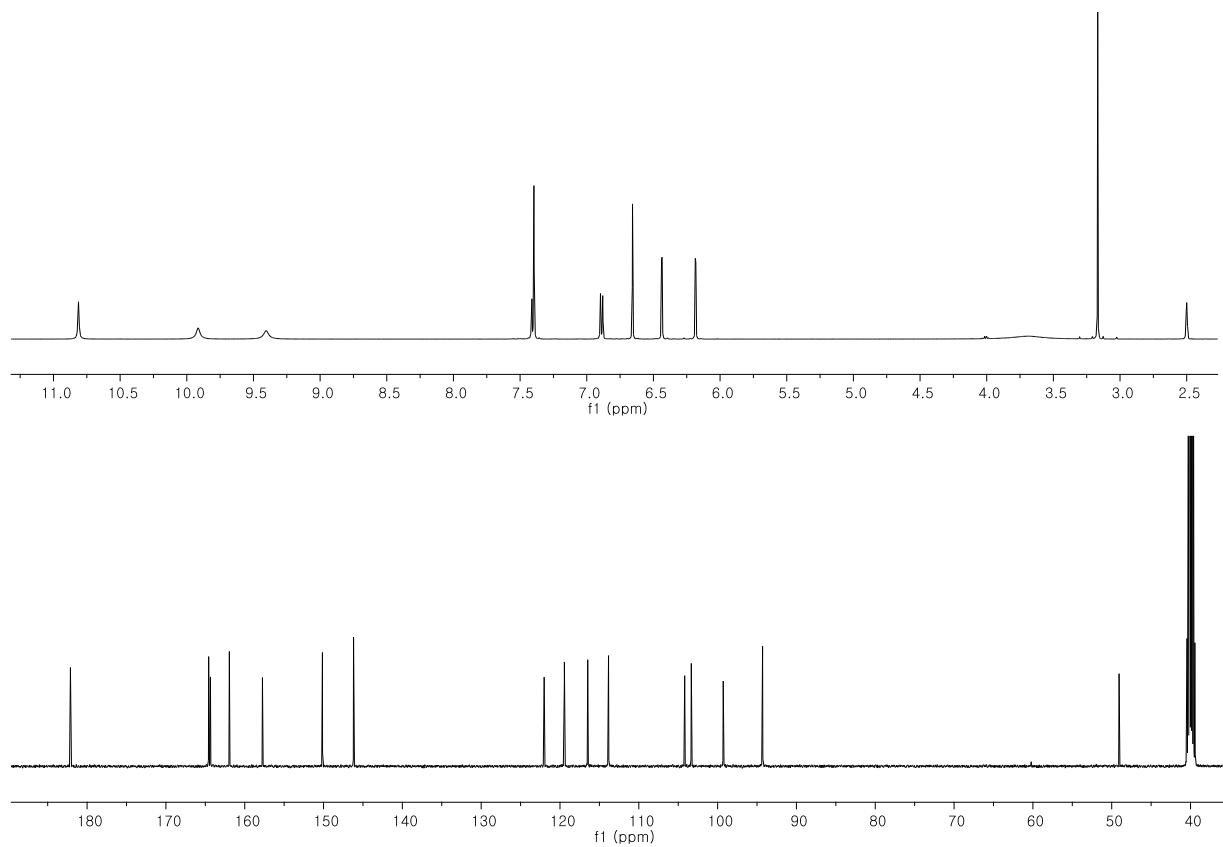


Fig. S77. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **19**

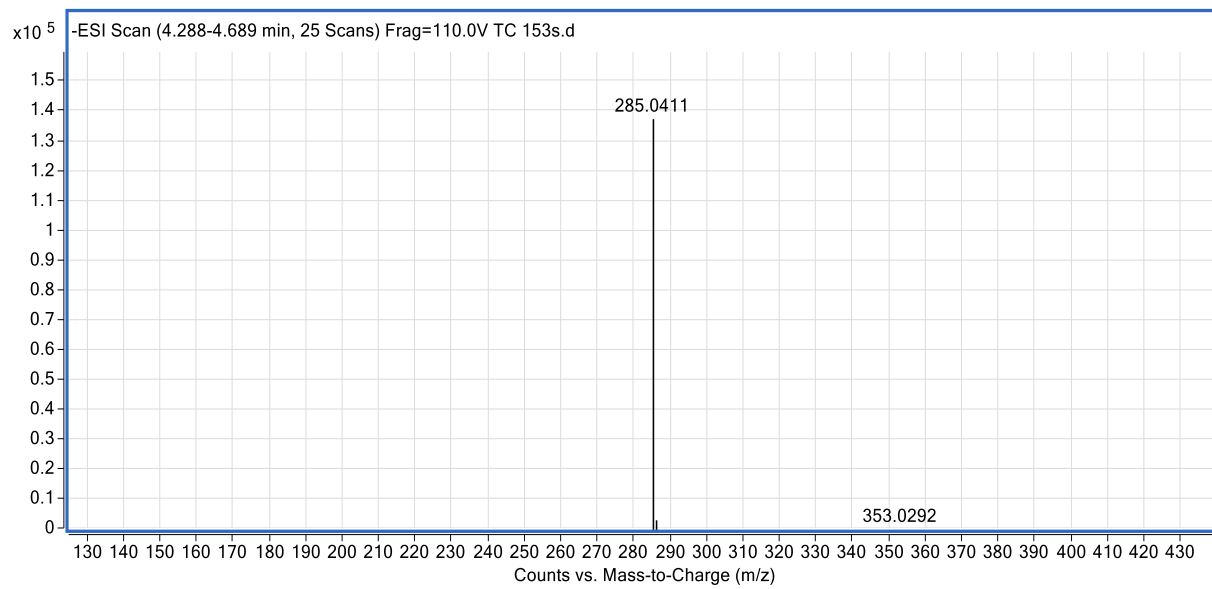


Fig. S78. MS spectrum of compound **19**

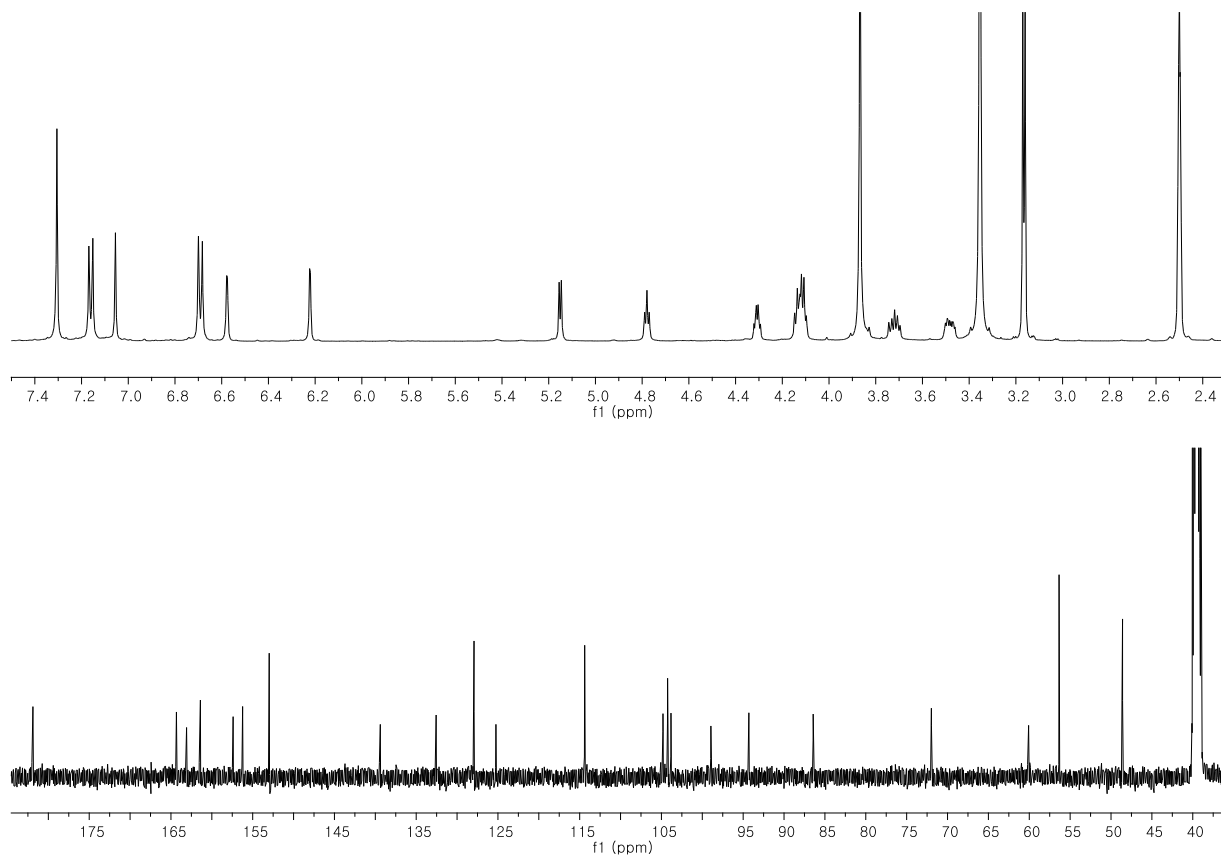


Fig. S79. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **20**

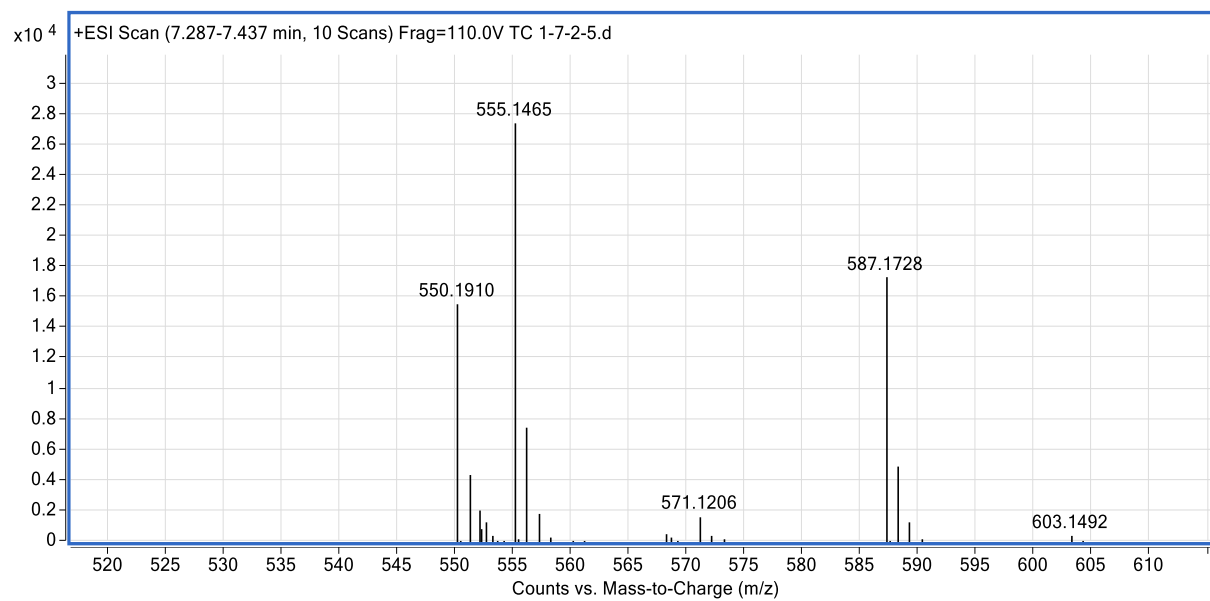


Fig. S80. MS spectrum of compound **20**

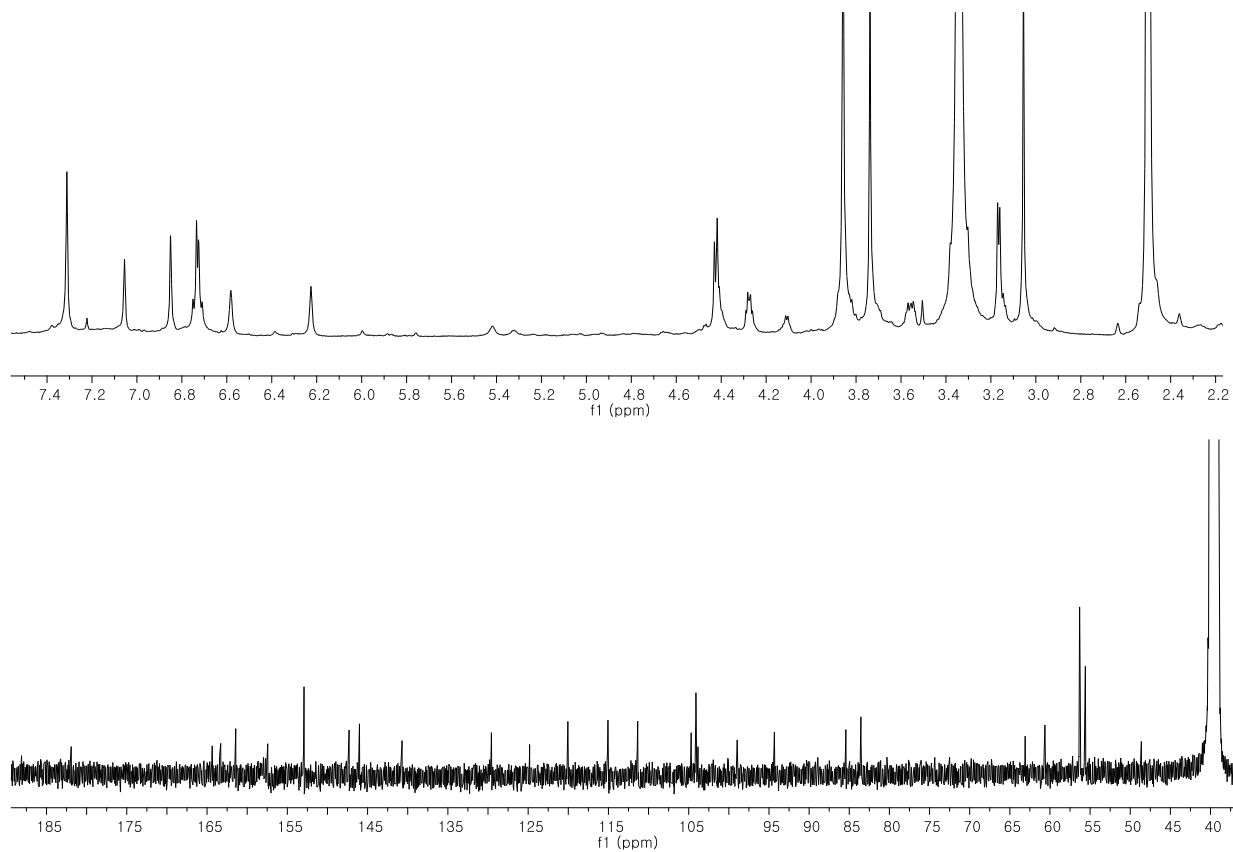


Fig. S81. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **21**

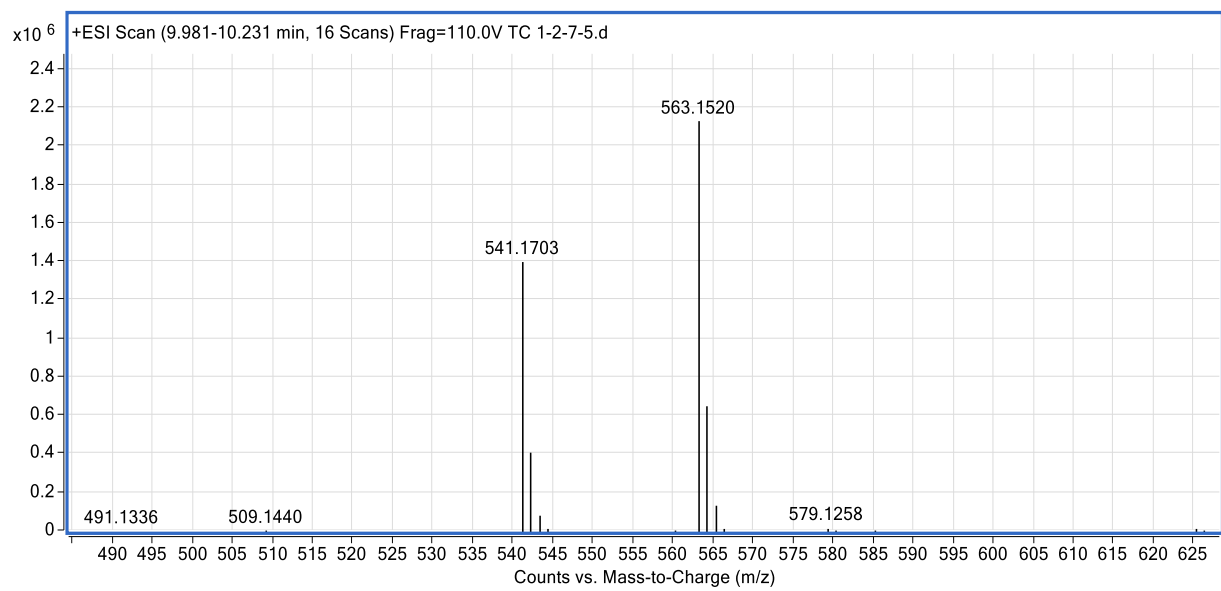


Fig. S82. MS spectrum of compound **21**

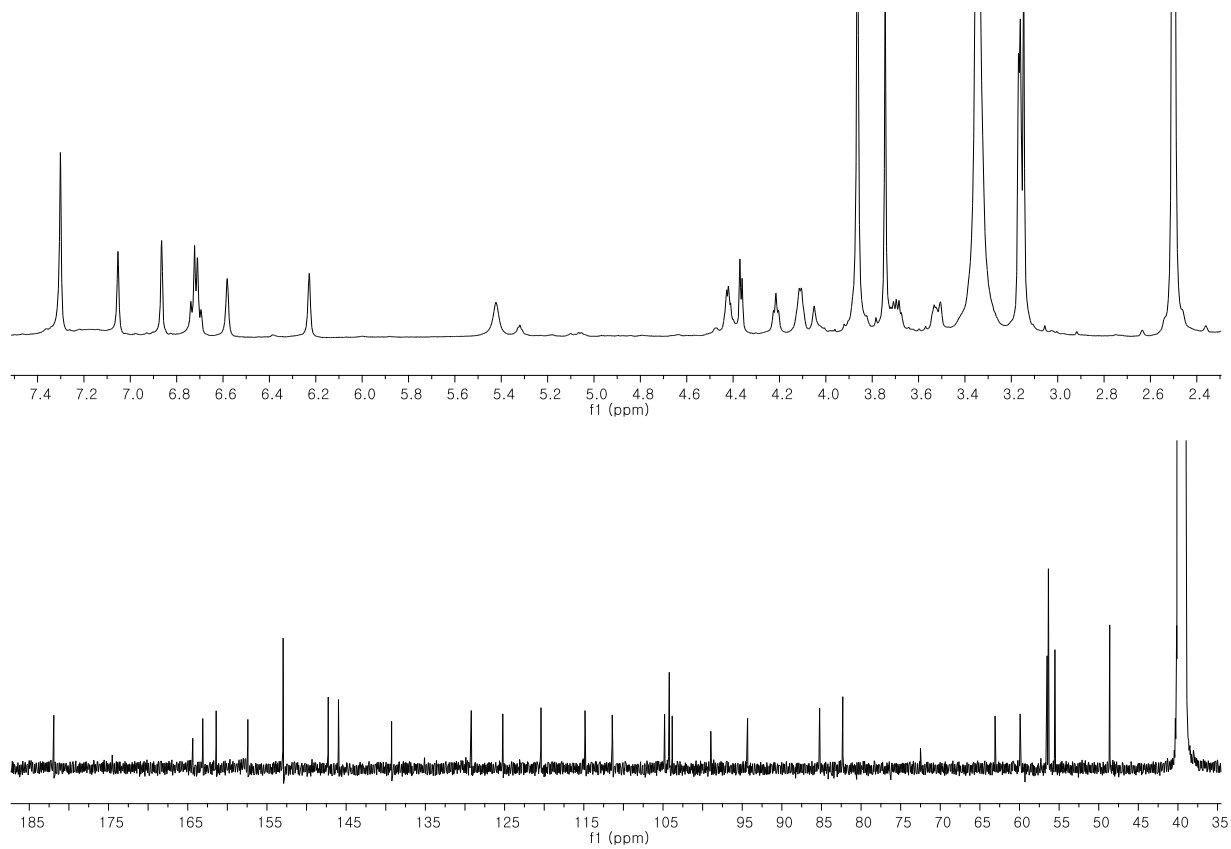


Fig. S83. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **22**

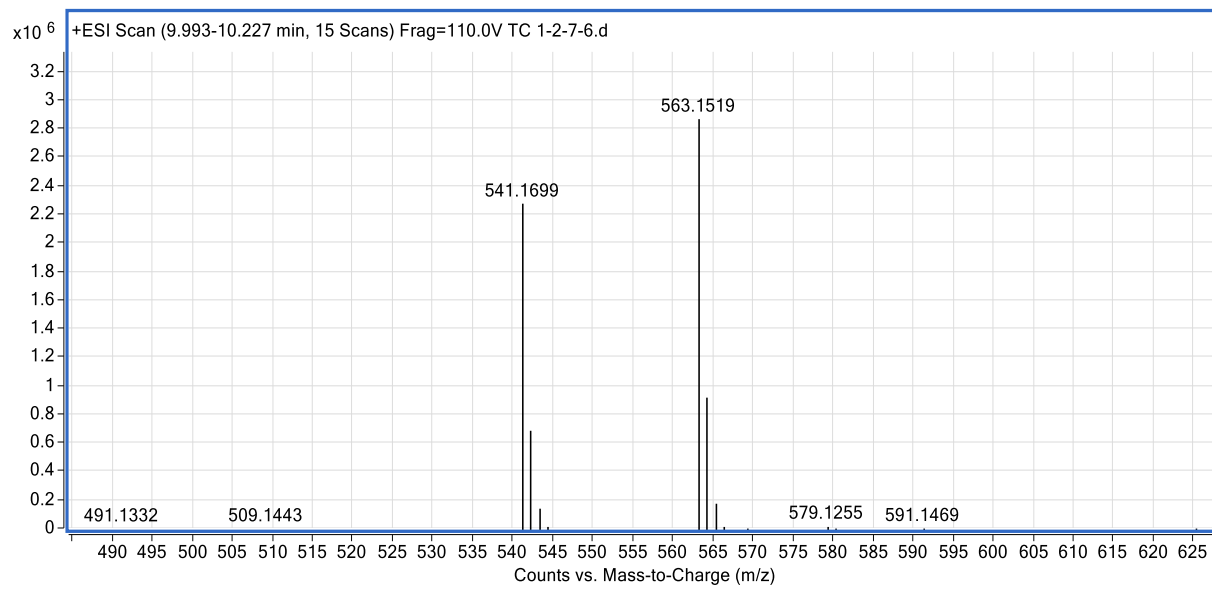


Fig. S84. MS spectrum of compound **22**

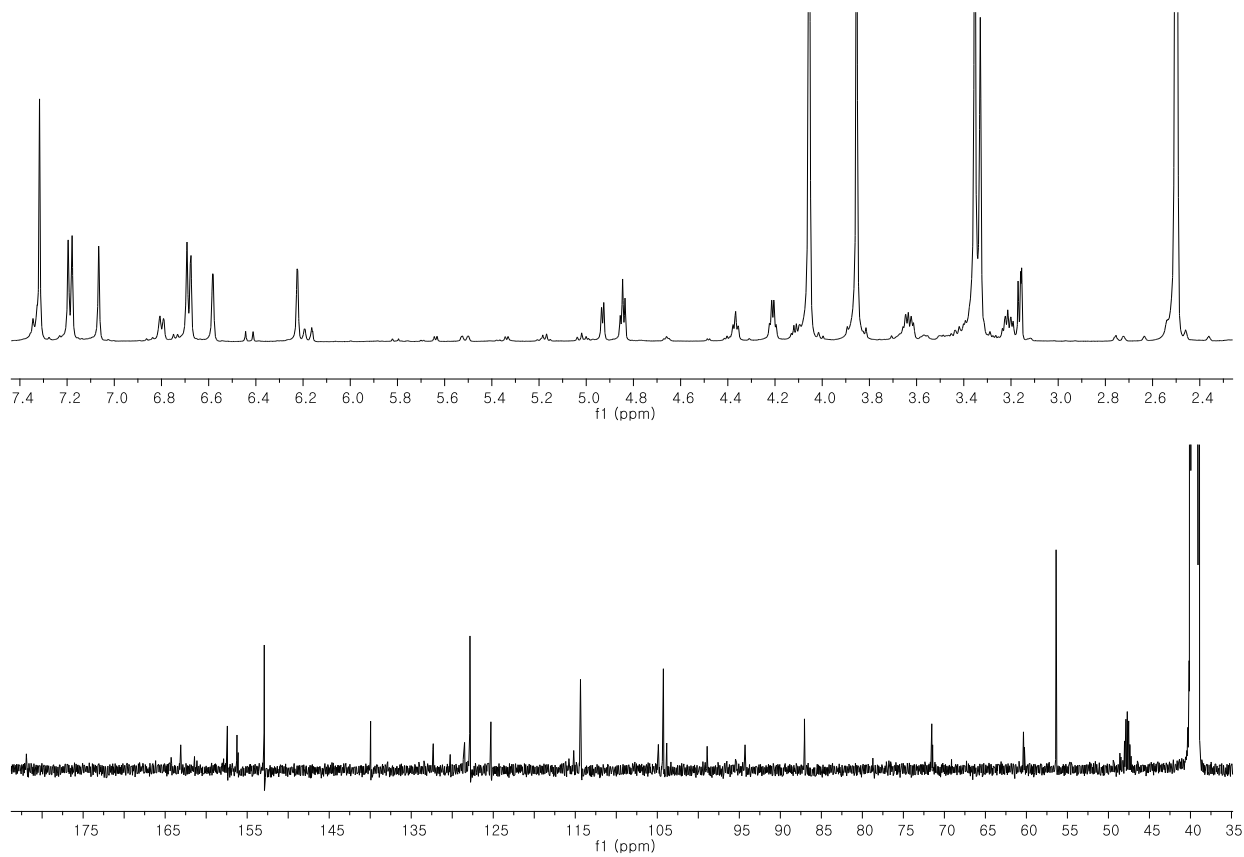


Fig. S85. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **23**

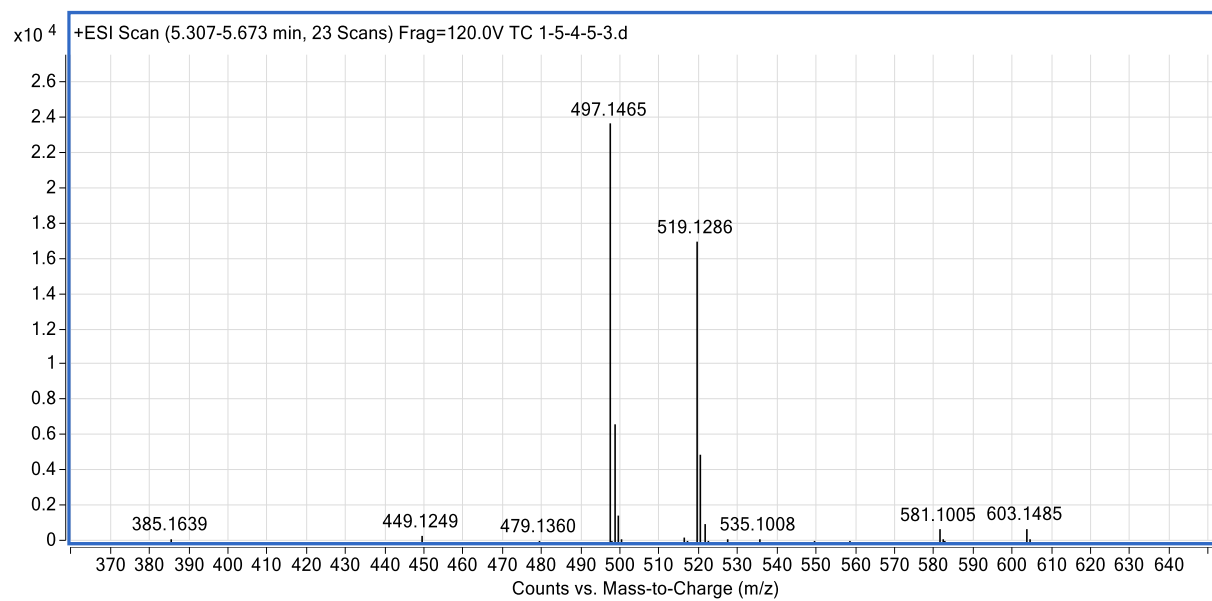


Fig. S86. MS spectrum of compound **23**

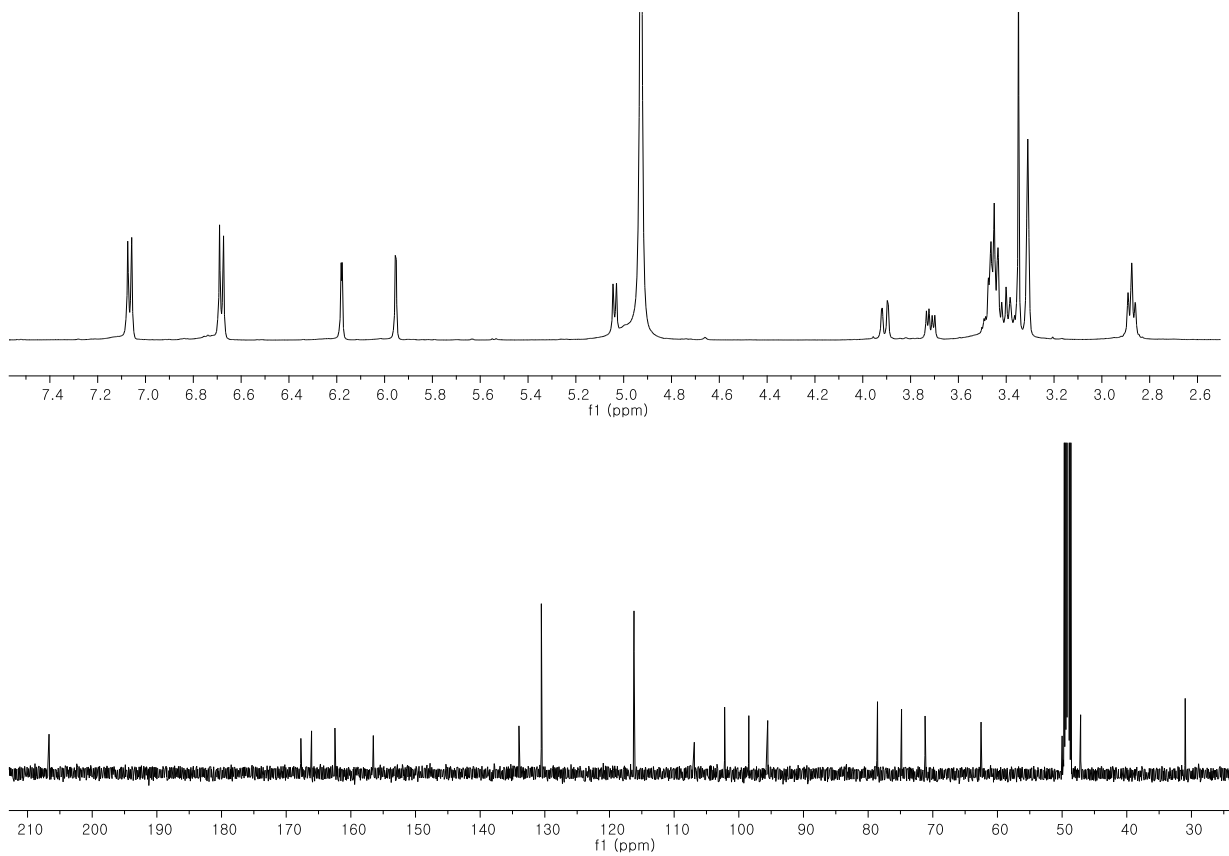


Fig. S87. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **24**

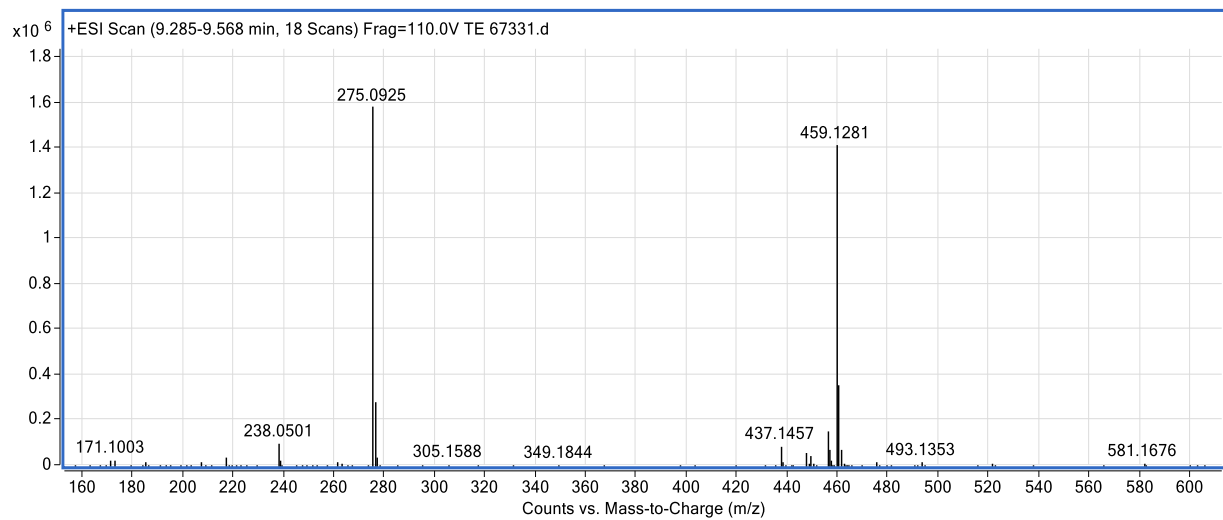


Fig. S88. MS spectrum of compound **24**

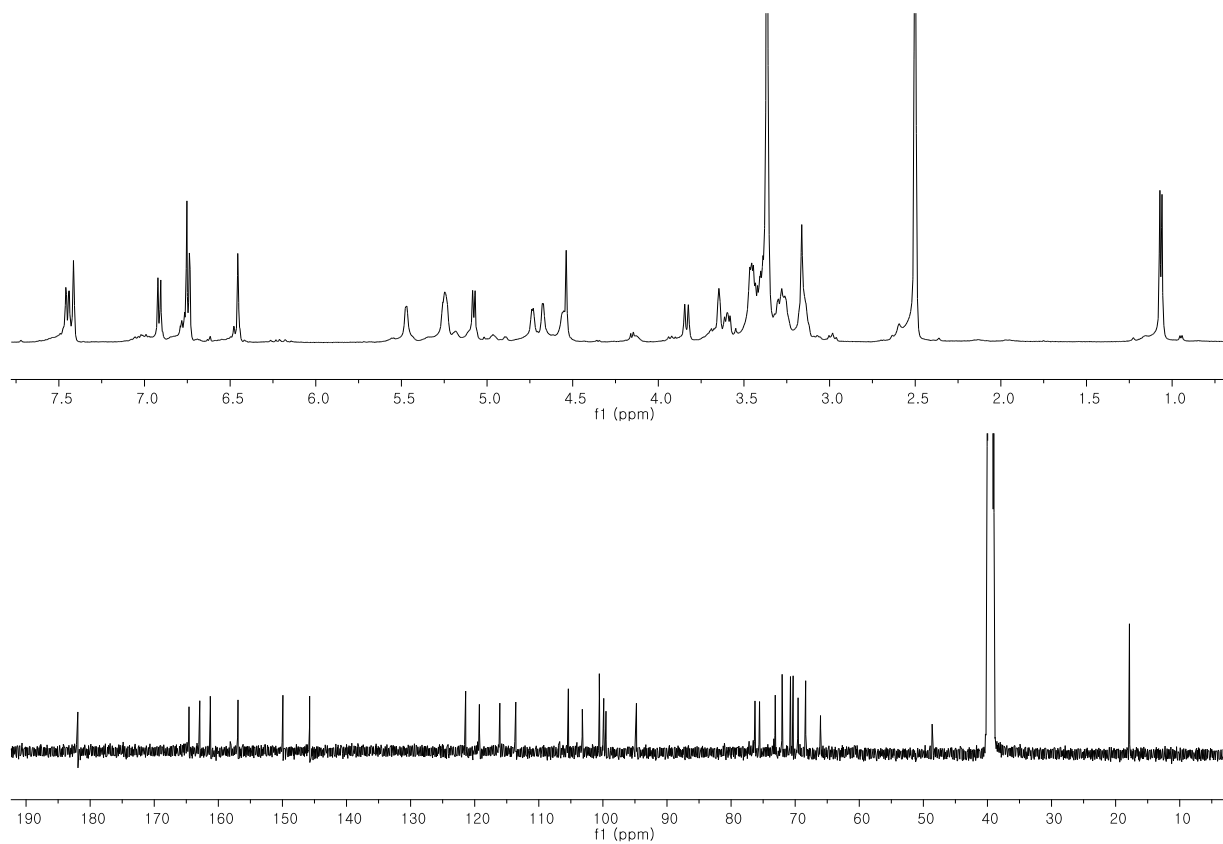


Fig. S89. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **25**

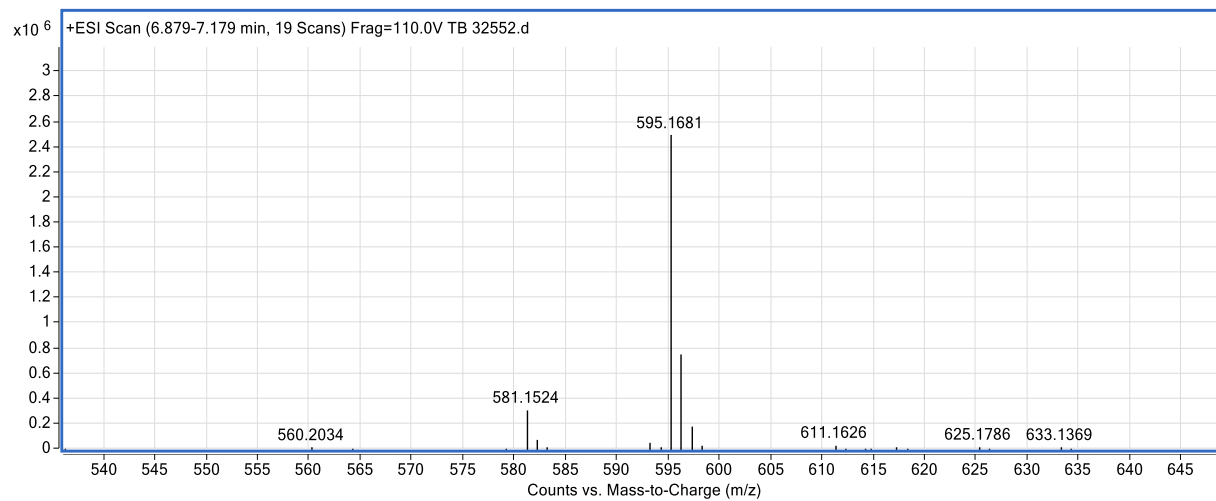


Fig. S90. MS spectrum of compound **25**

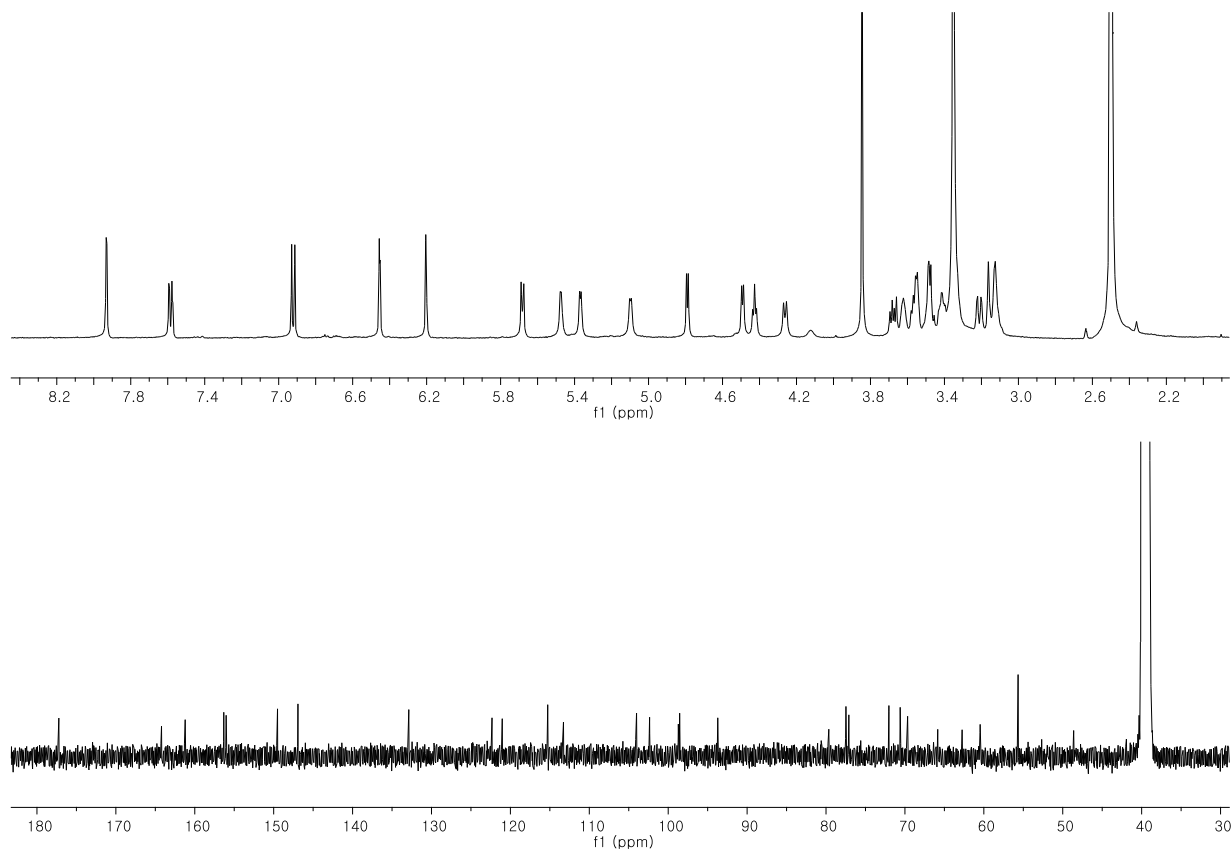


Fig. S91. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **26**

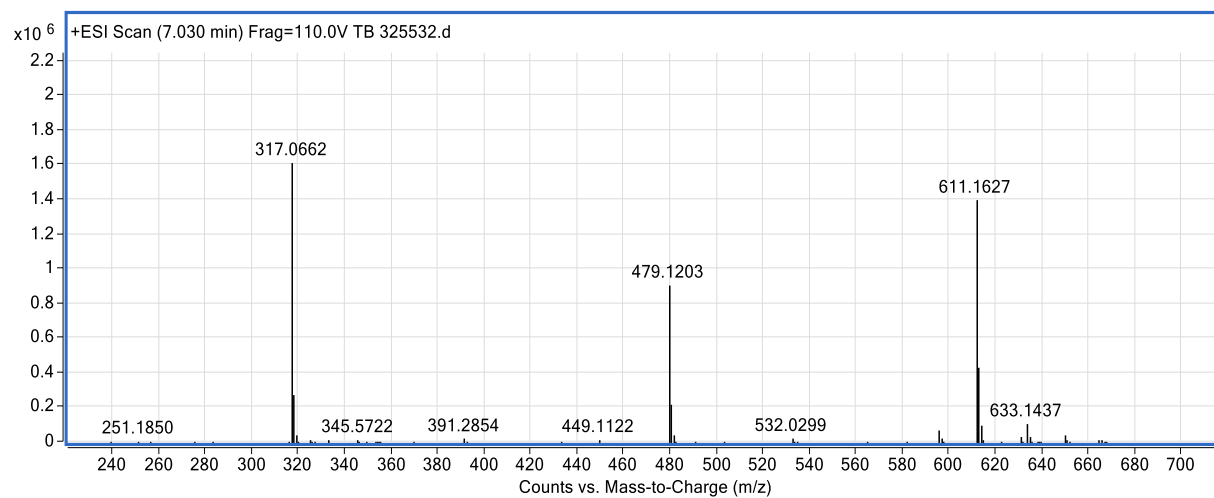


Fig. S92. MS spectrum of compound **26**

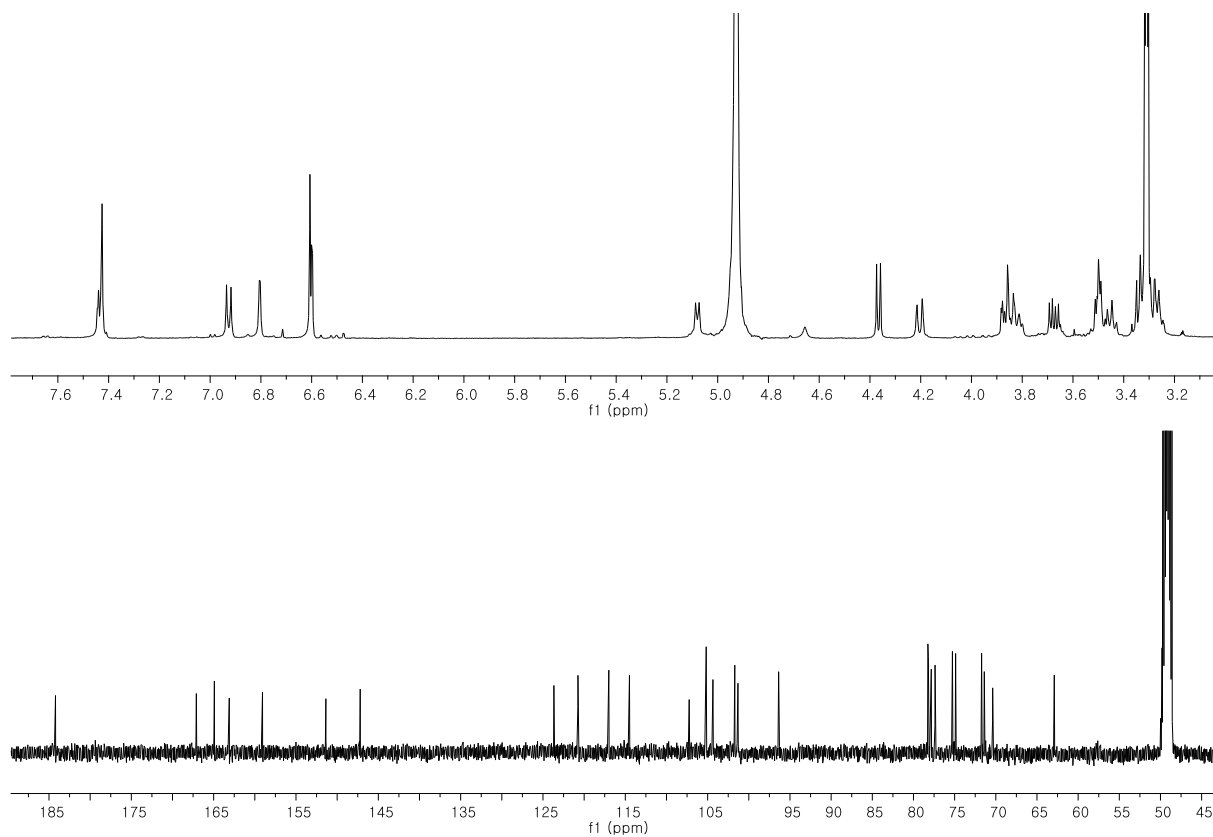


Fig. S93. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **27**

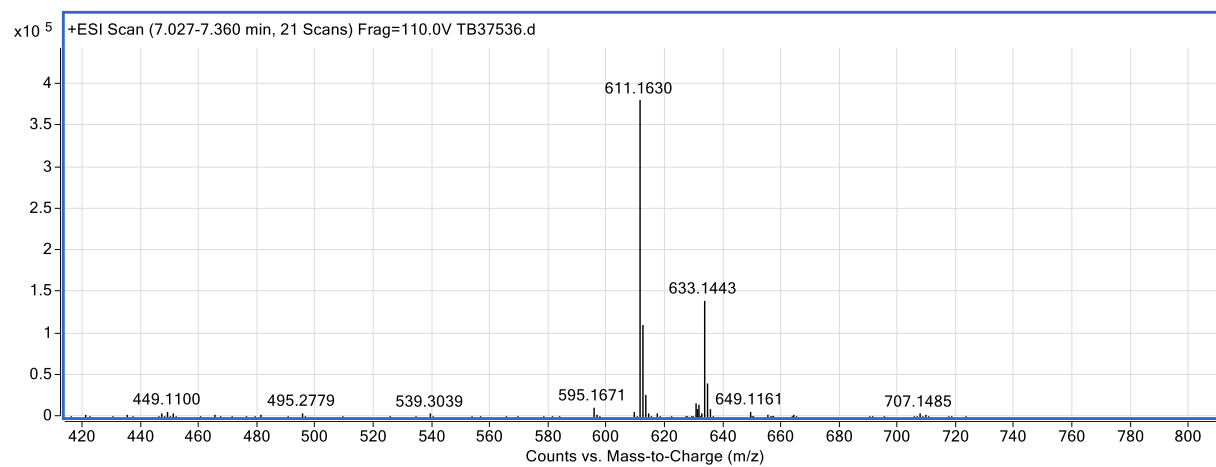


Fig. S94. MS spectrum of compound **27**

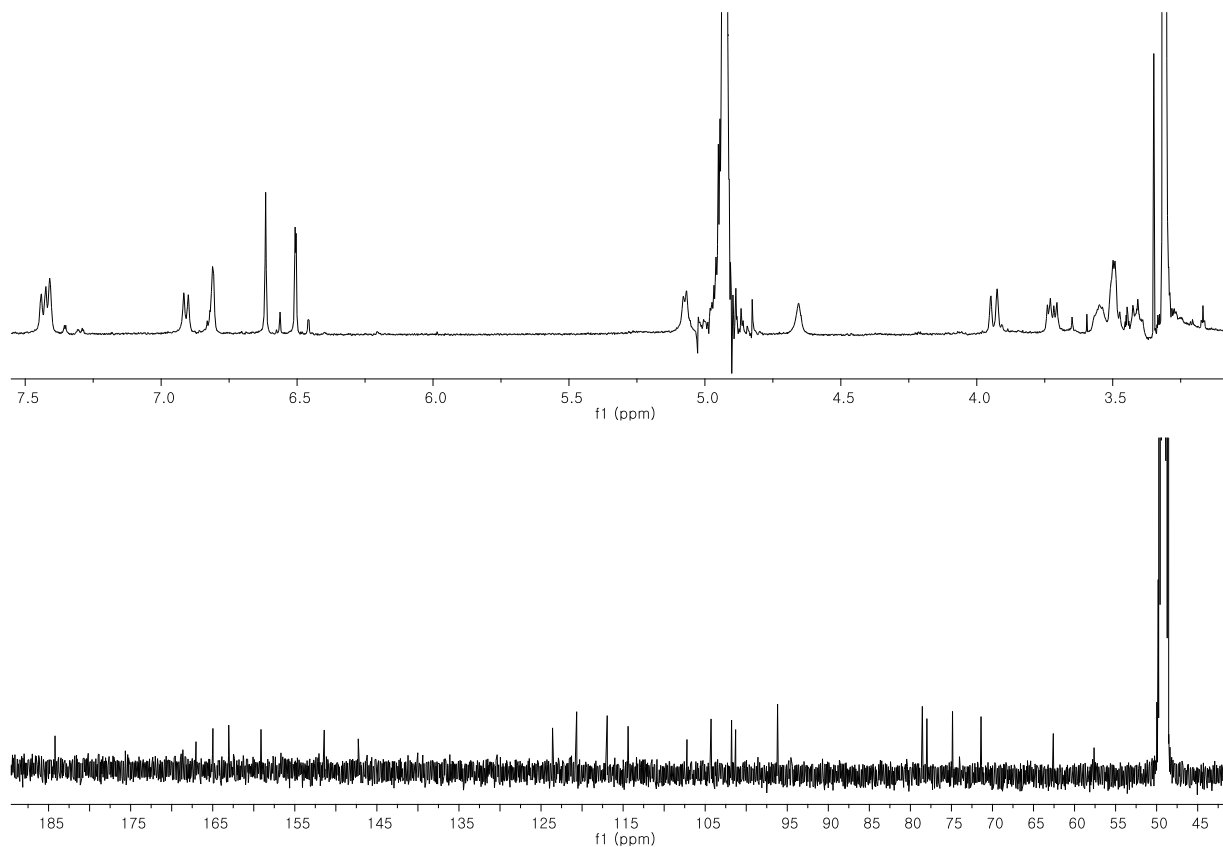


Fig. S95. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **28**

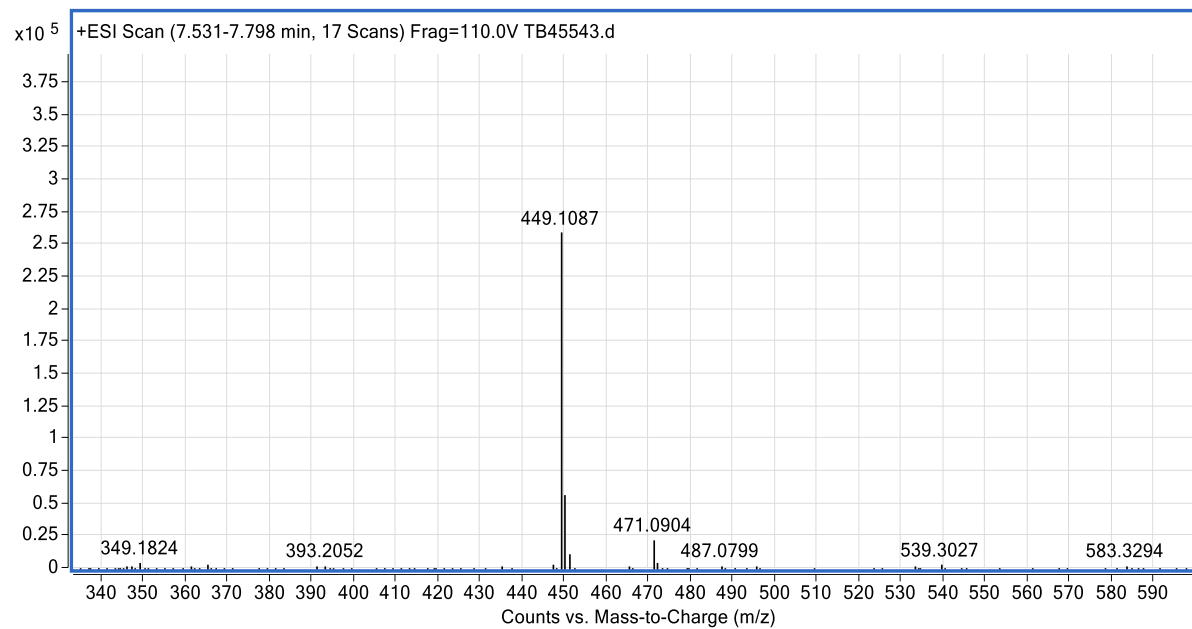


Fig. S96. MS spectrum of compound **28**

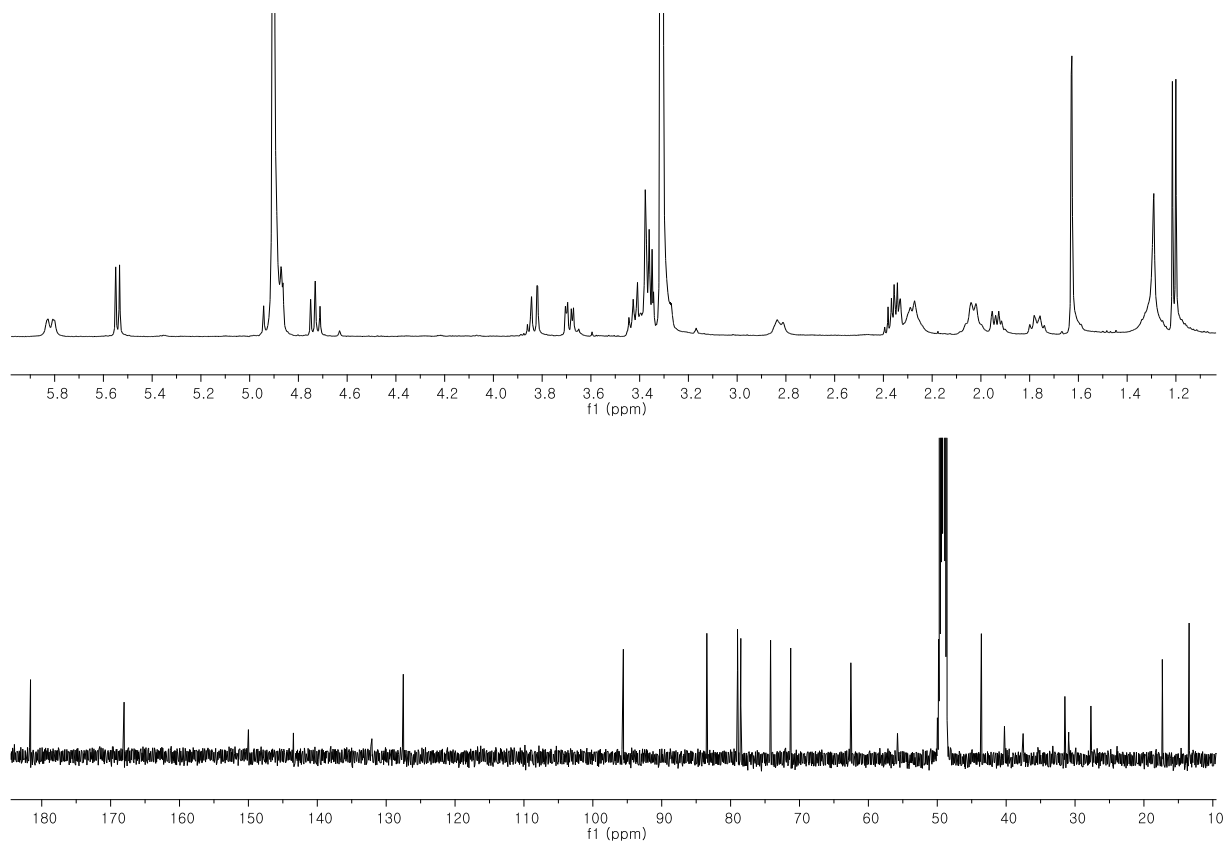


Fig. S97. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **29**

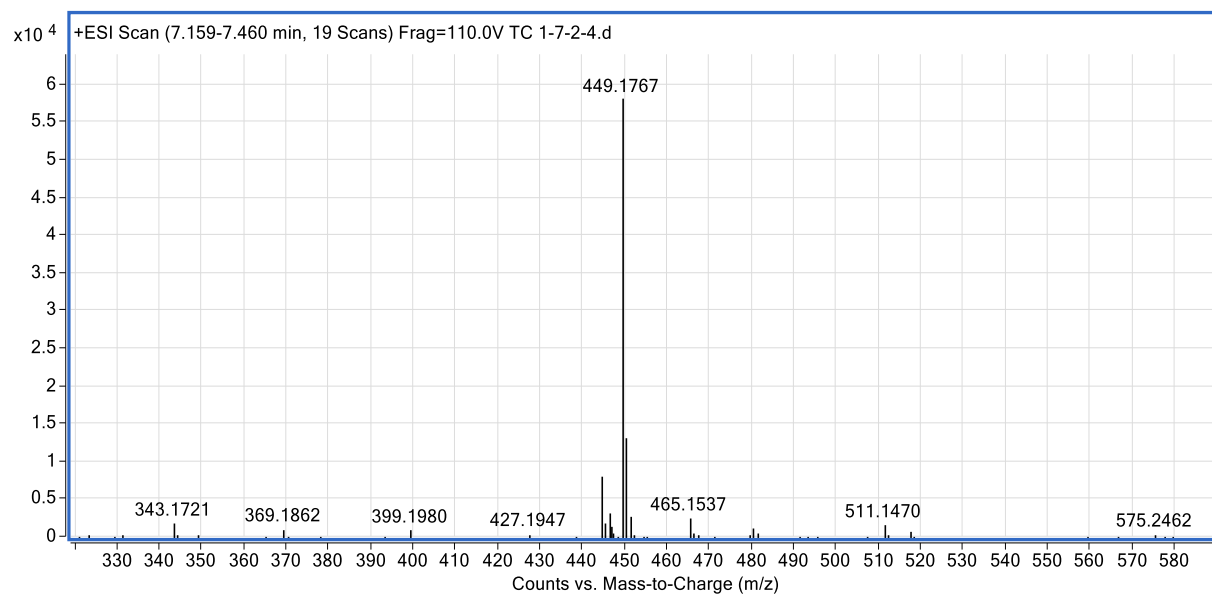


Fig. S98. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **29**

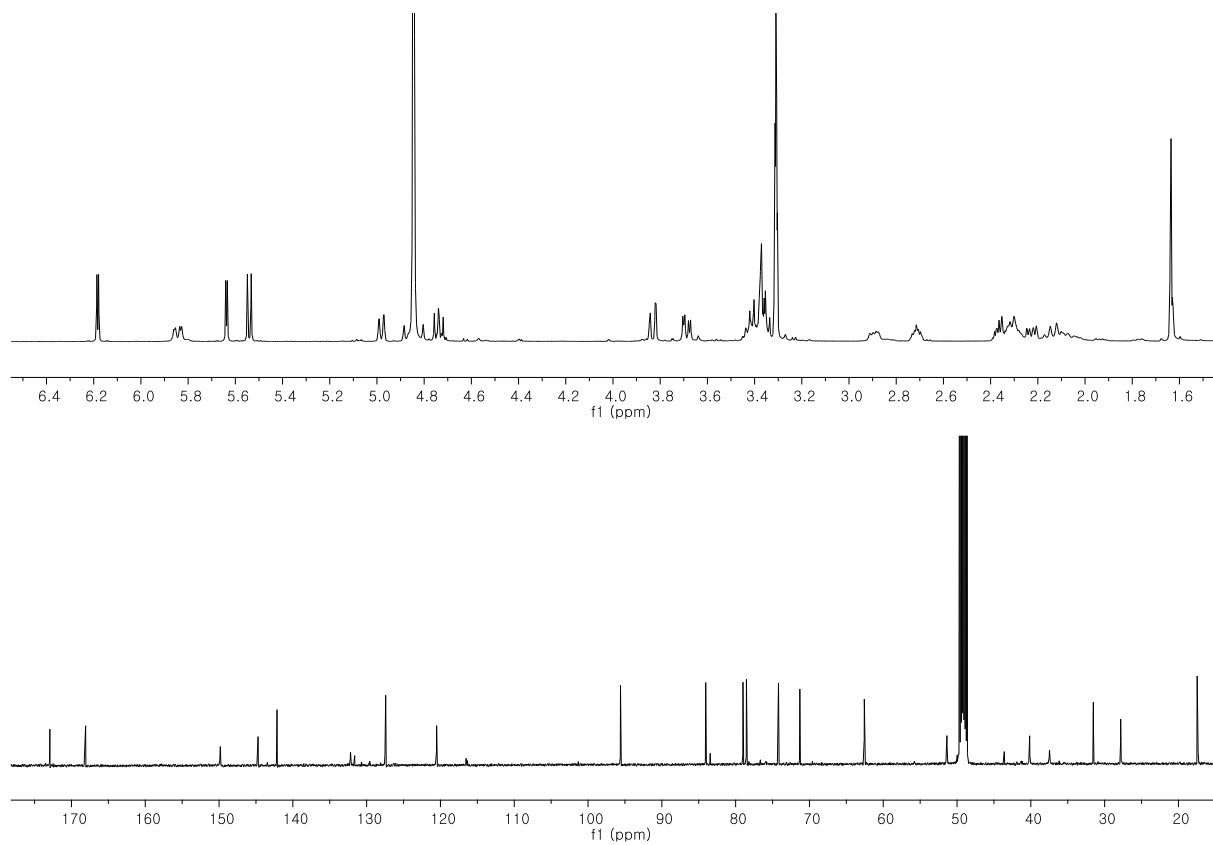


Fig. S99. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **30**

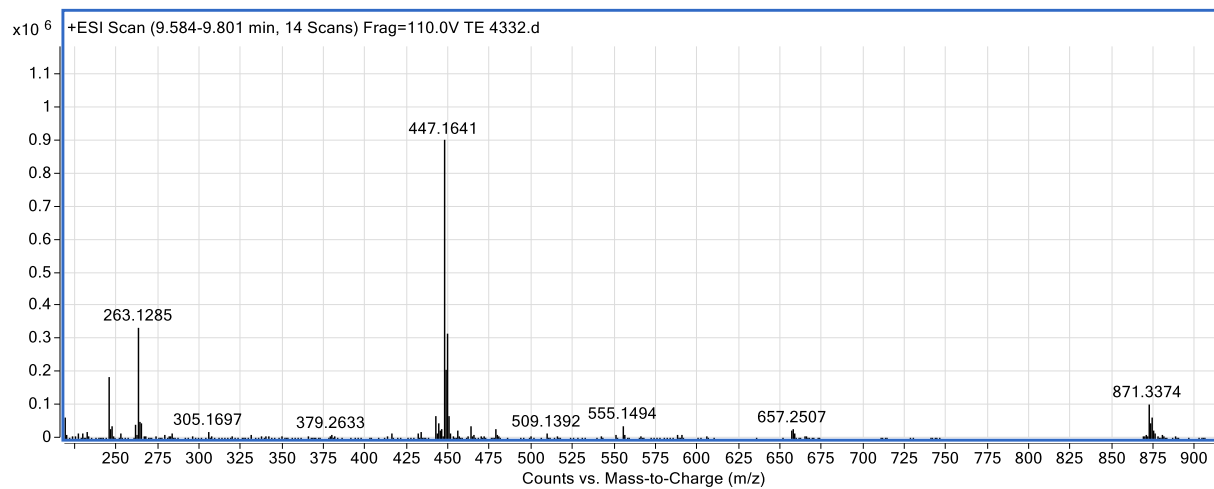


Fig. S100. MS spectrum of compound **30**

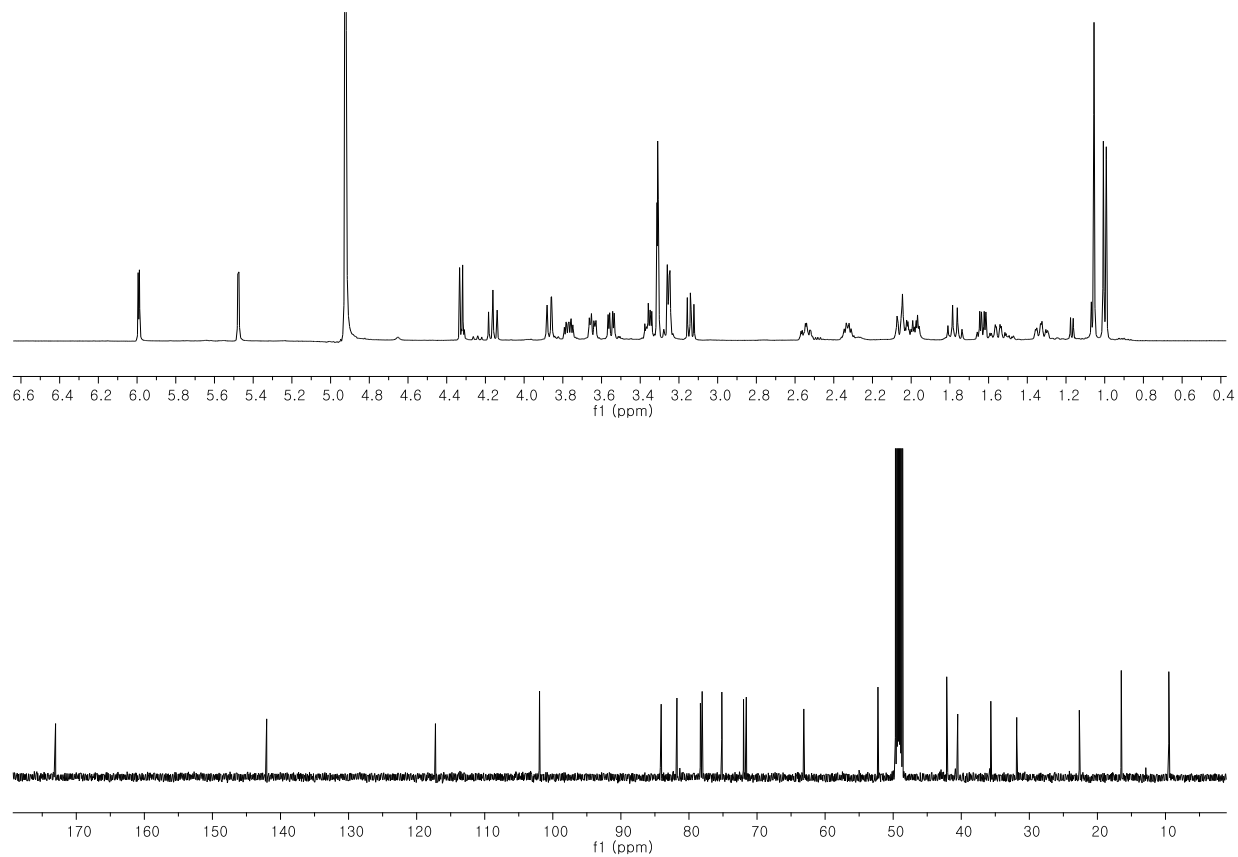


Fig. S101. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **31**

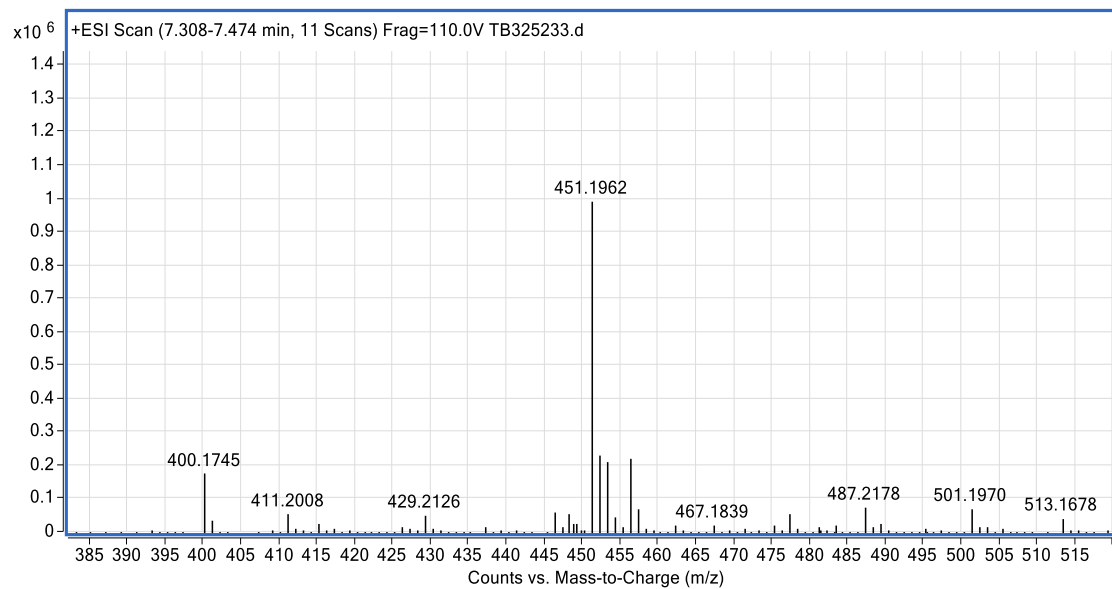


Fig. S102. MS spectrum of compound **31**

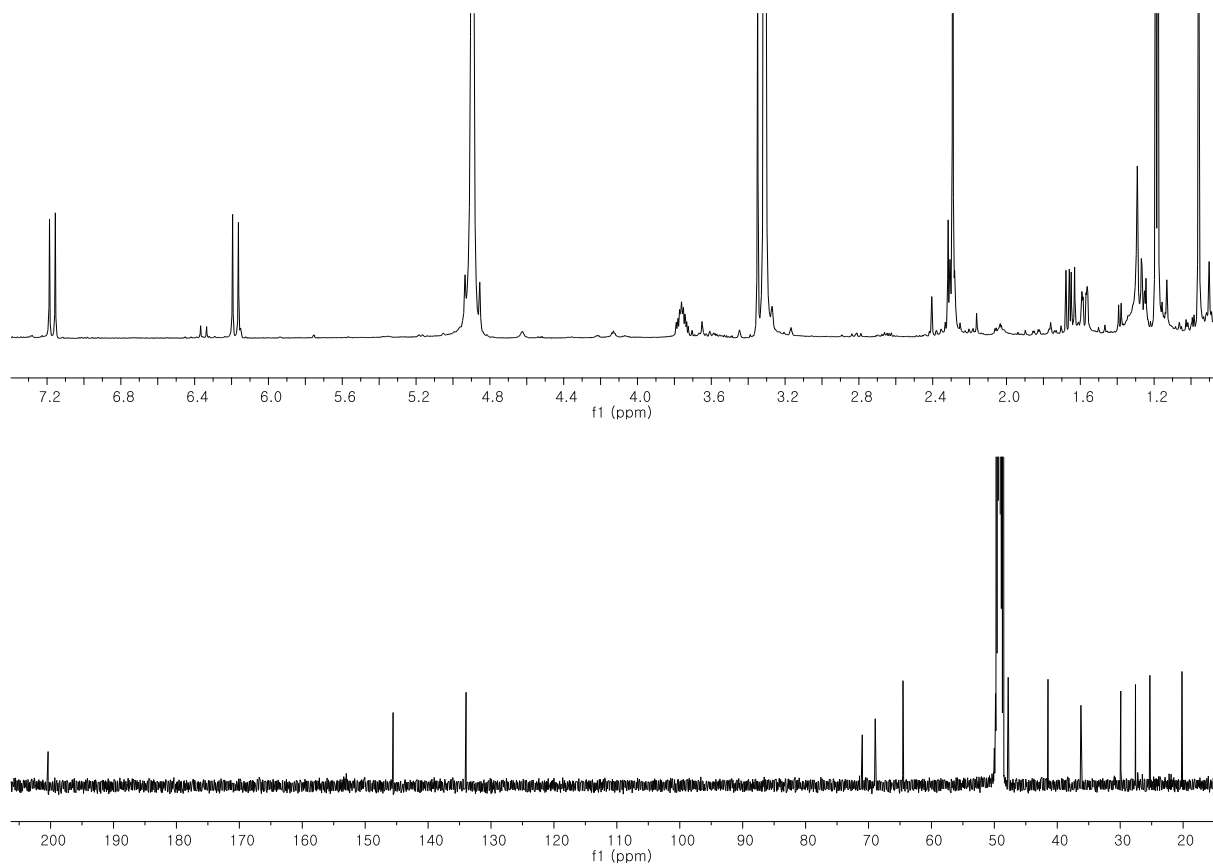


Fig. S103. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **32**

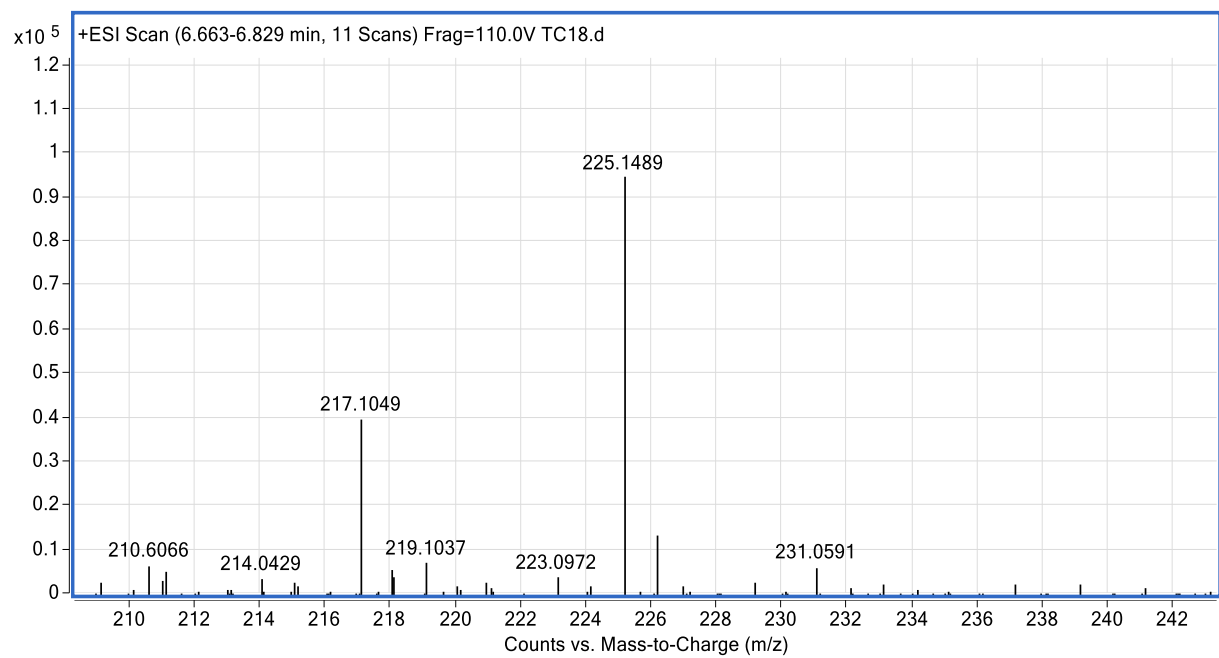


Fig. S104. MS spectrum of compound **32**

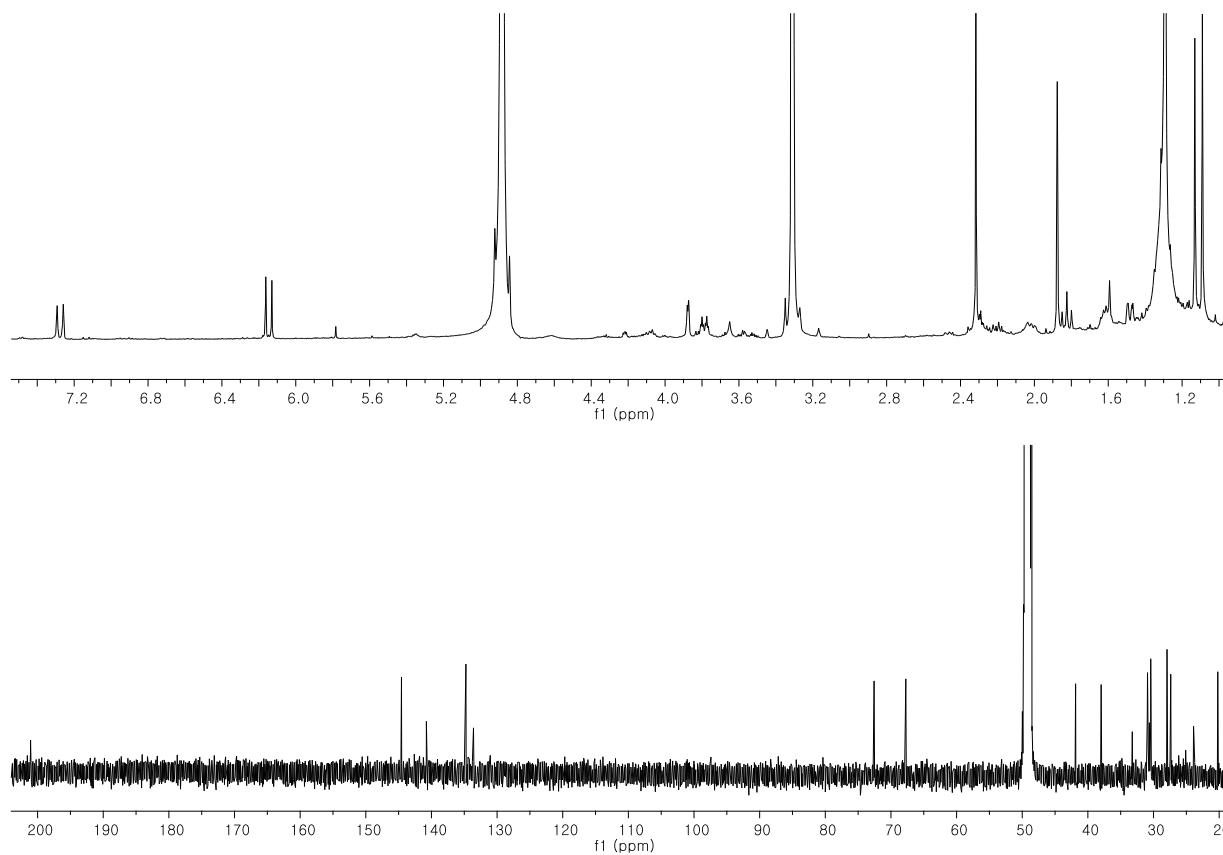


Fig. S105. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **33**

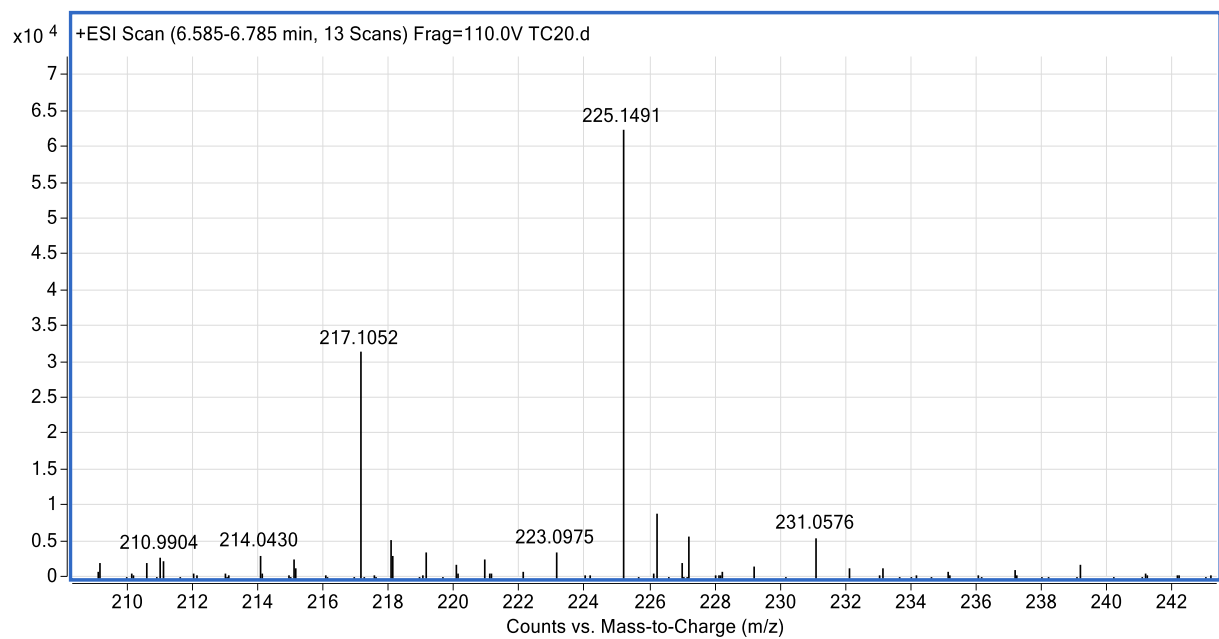


Fig. S106. MS spectrum of compound **33**

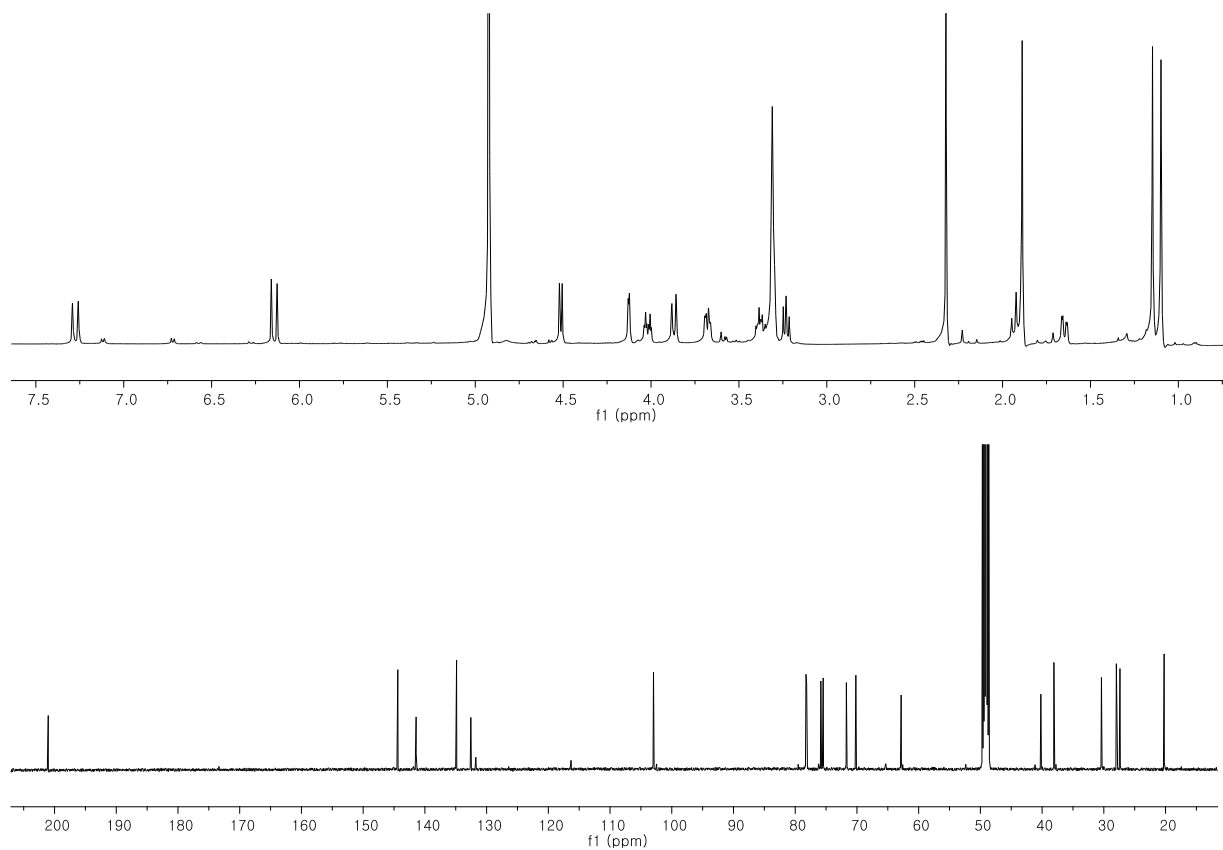


Fig. S107. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **34**

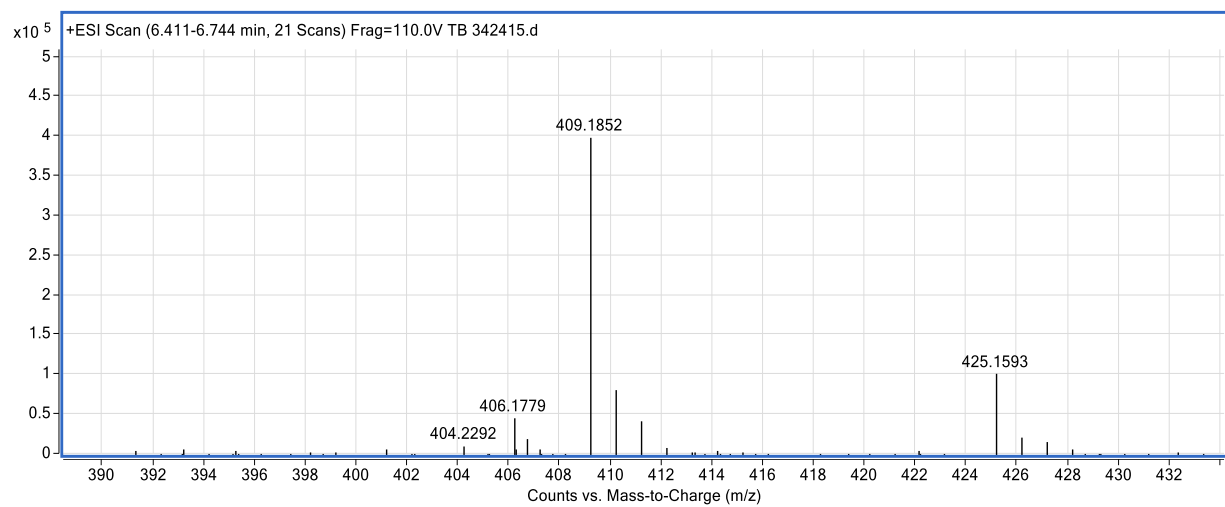


Fig. S108. MS spectrum of compound **34**

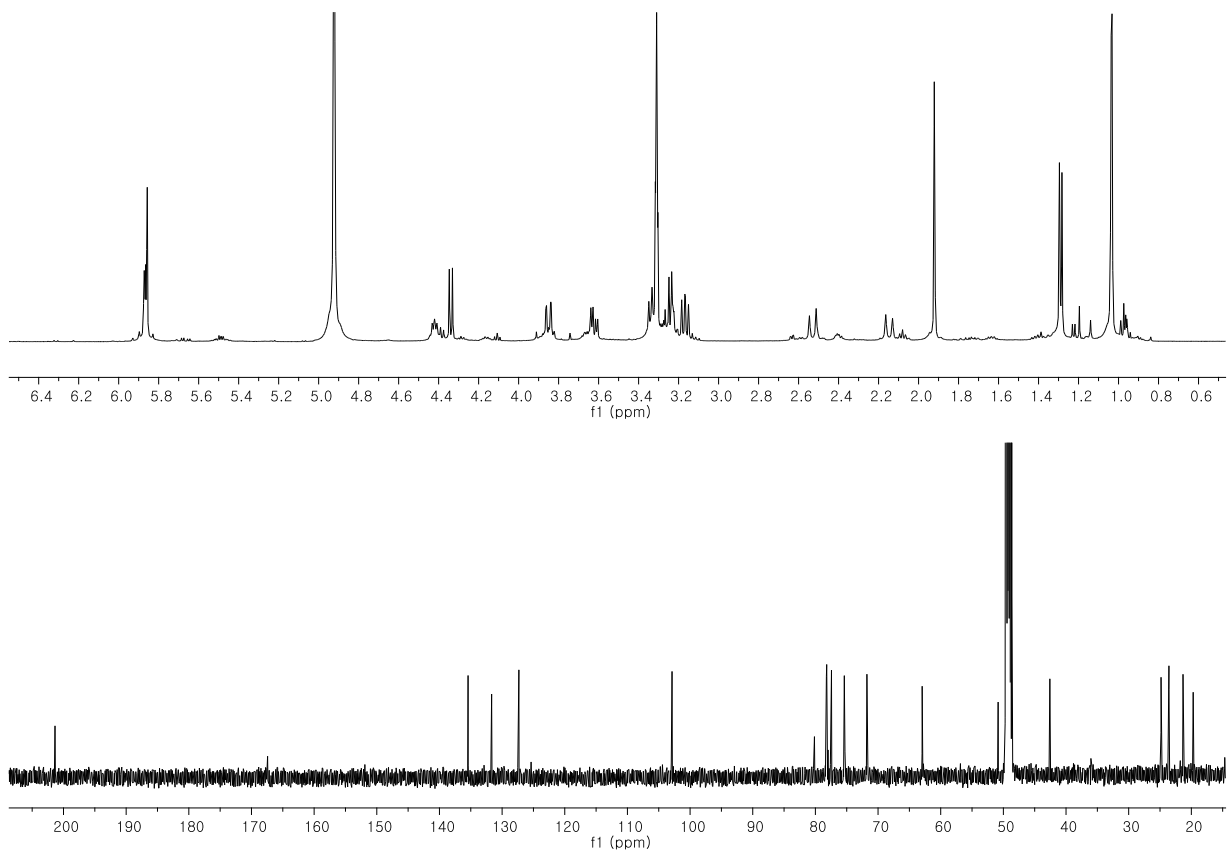


Fig. S109. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **35**

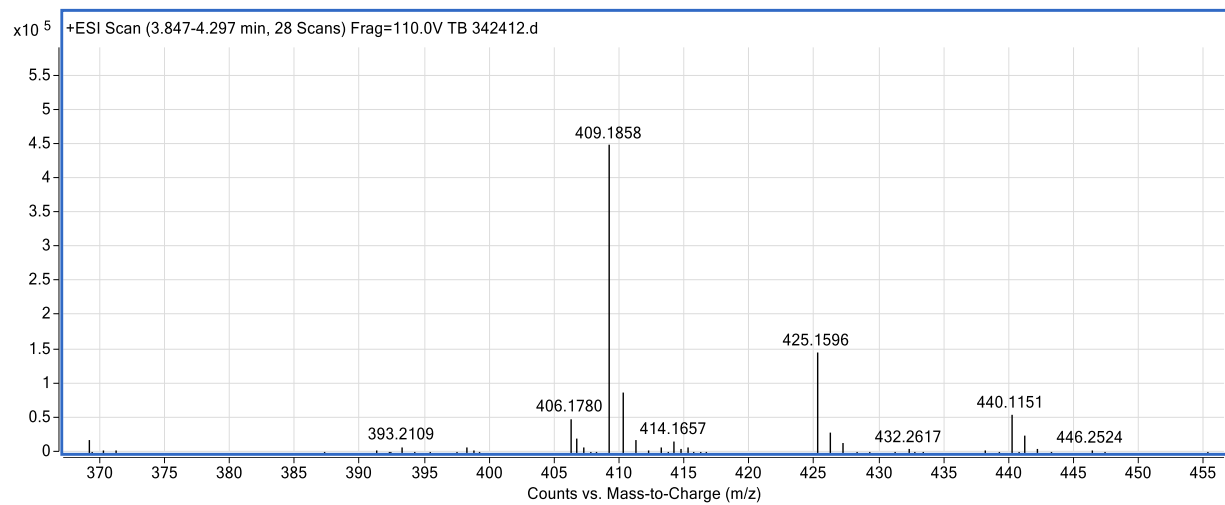


Fig. S110. MS spectrum of compound **35**

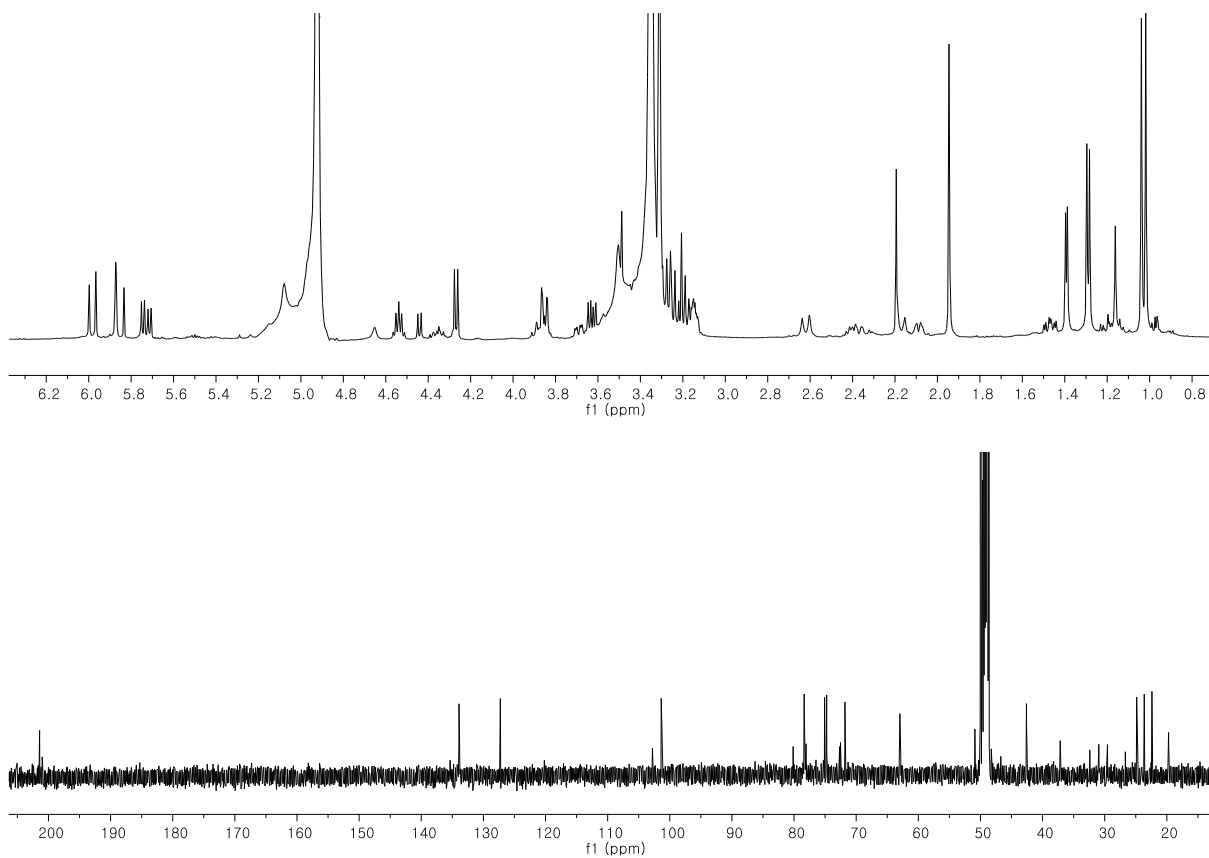


Fig. S111. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **36**

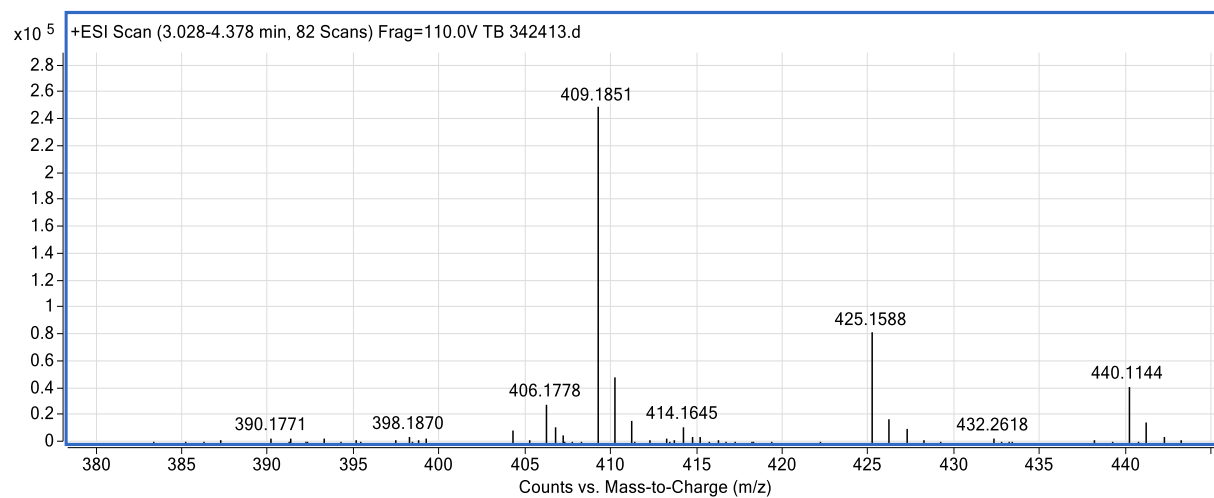


Fig. S112. MS spectrum of compound **36**

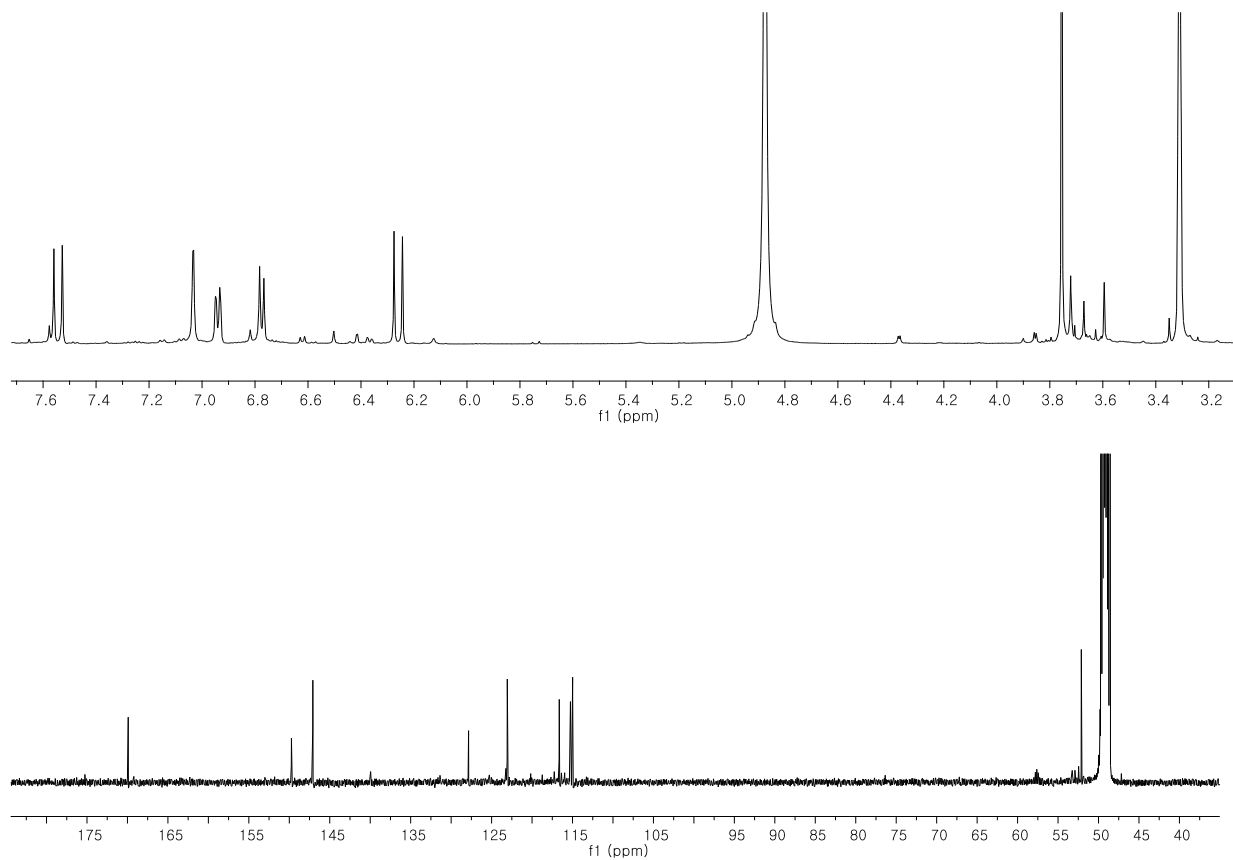


Fig. S113. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **37**

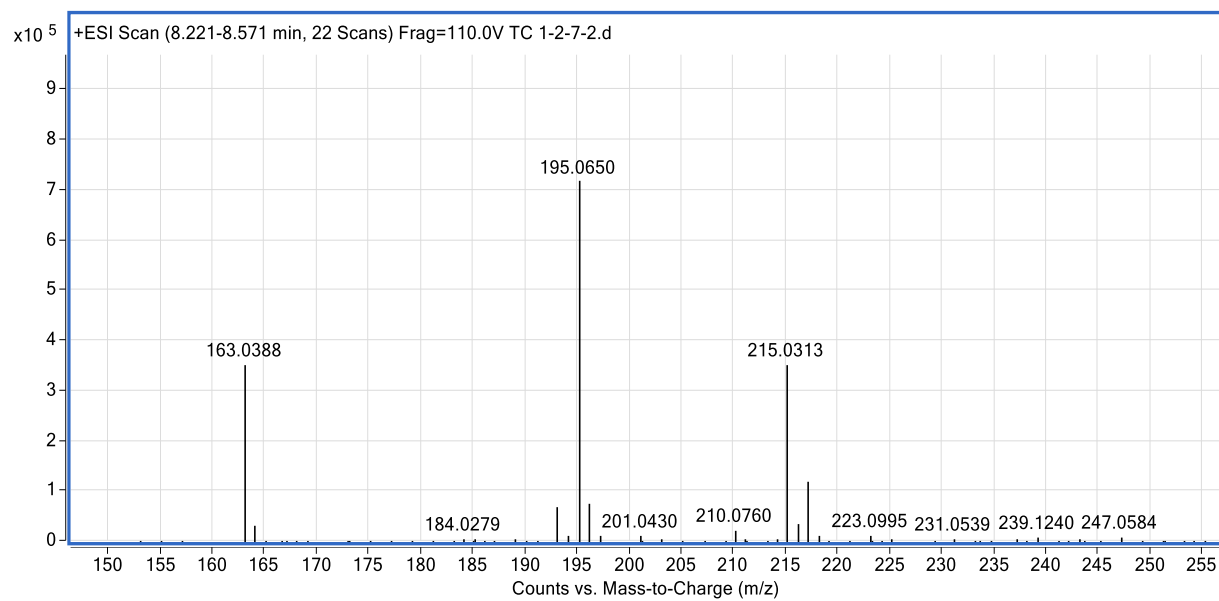


Fig. S114. MS spectrum of compound **37**

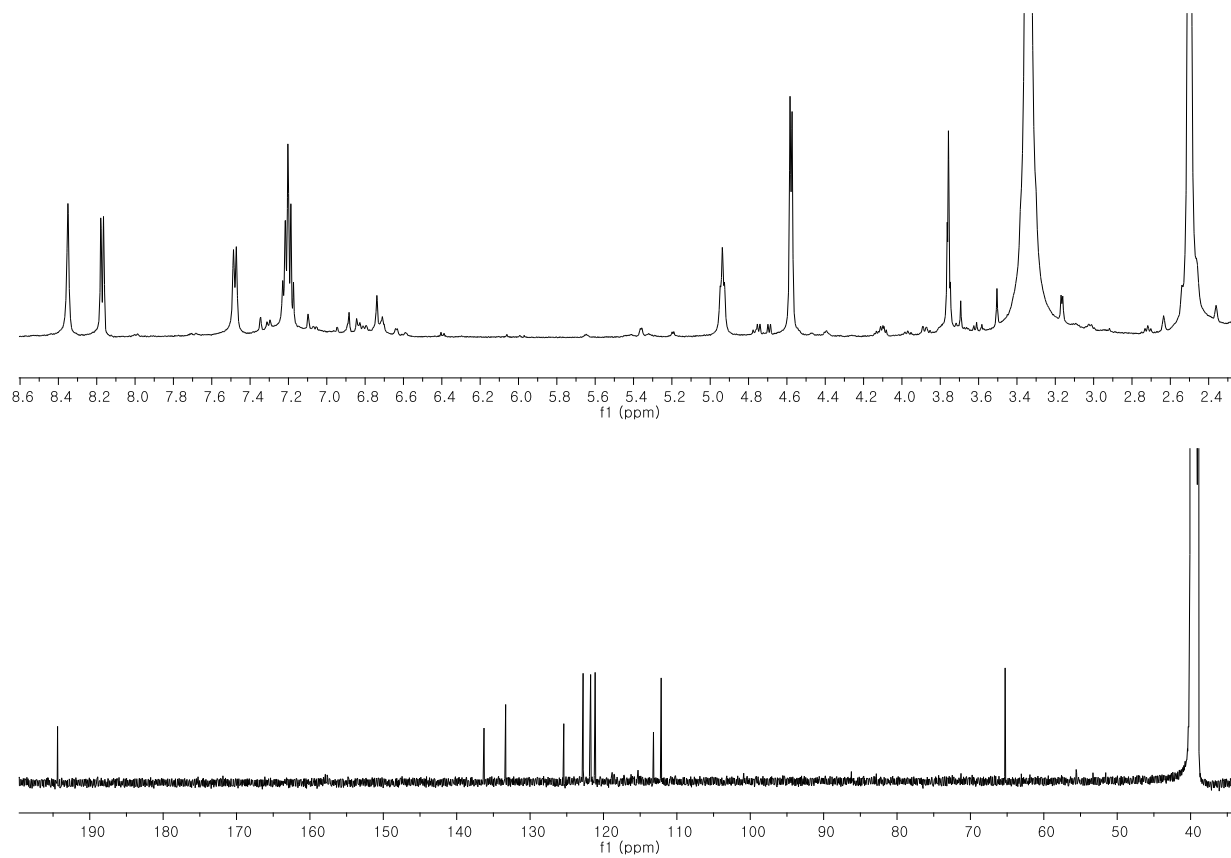


Fig. S115. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **38**

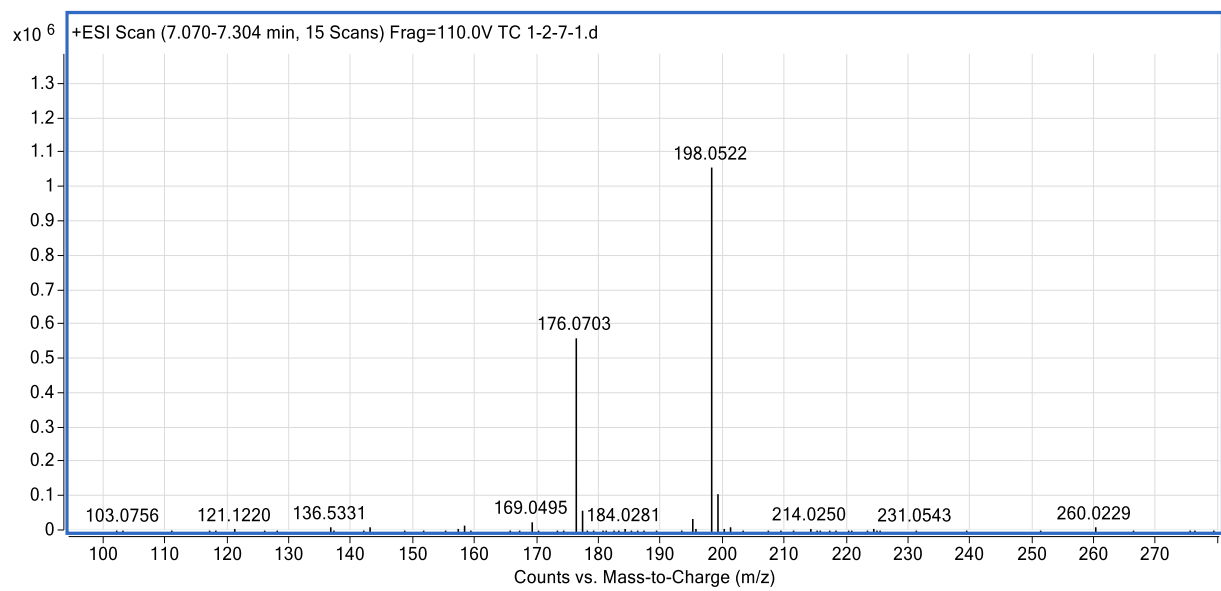


Fig. S116. MS spectrum of compound **38**

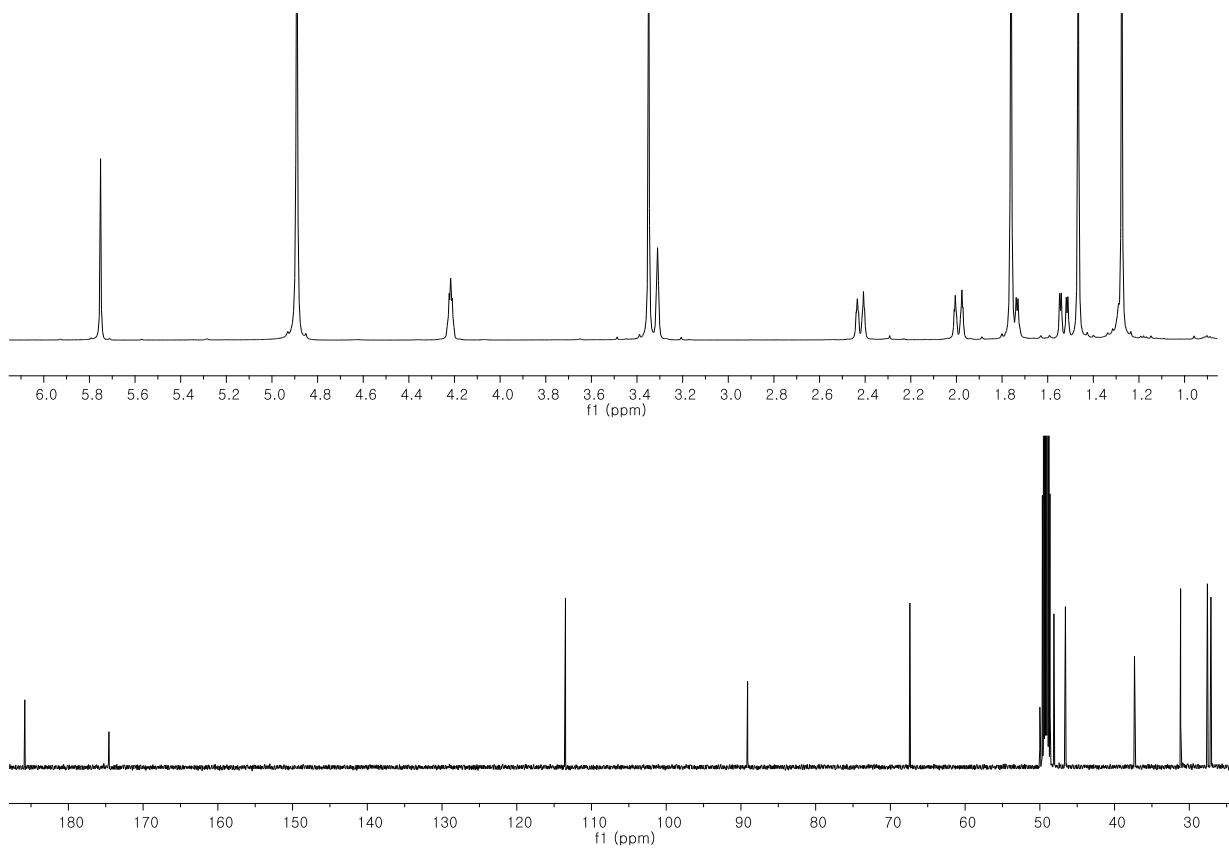


Fig. S117. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **39**

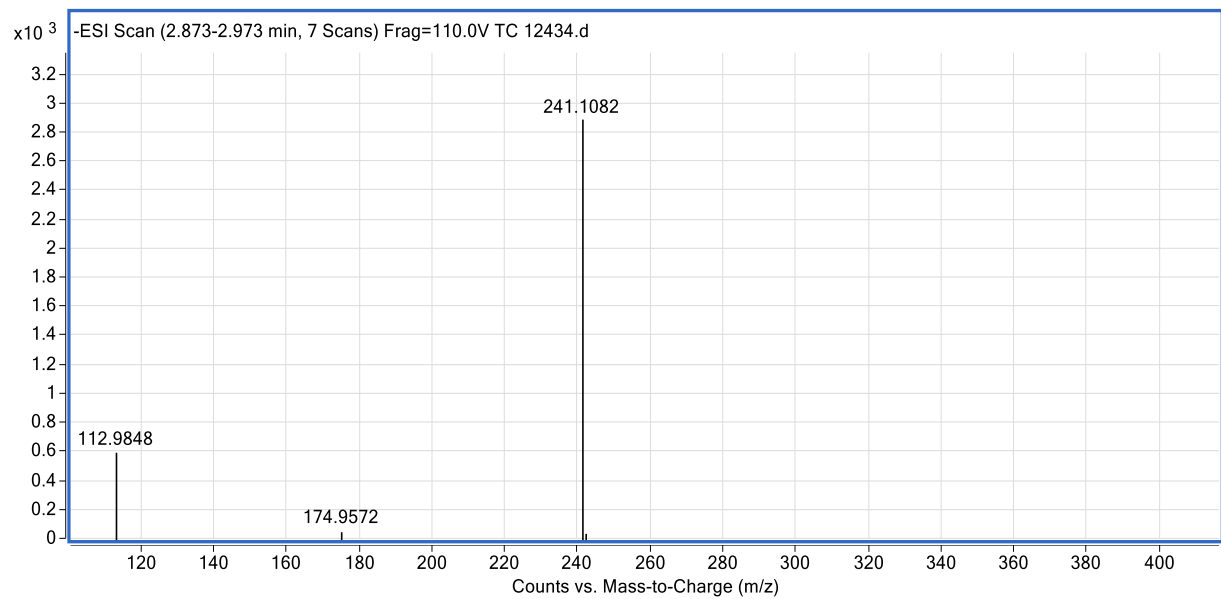


Fig. S118. MS spectrum of compound **39**

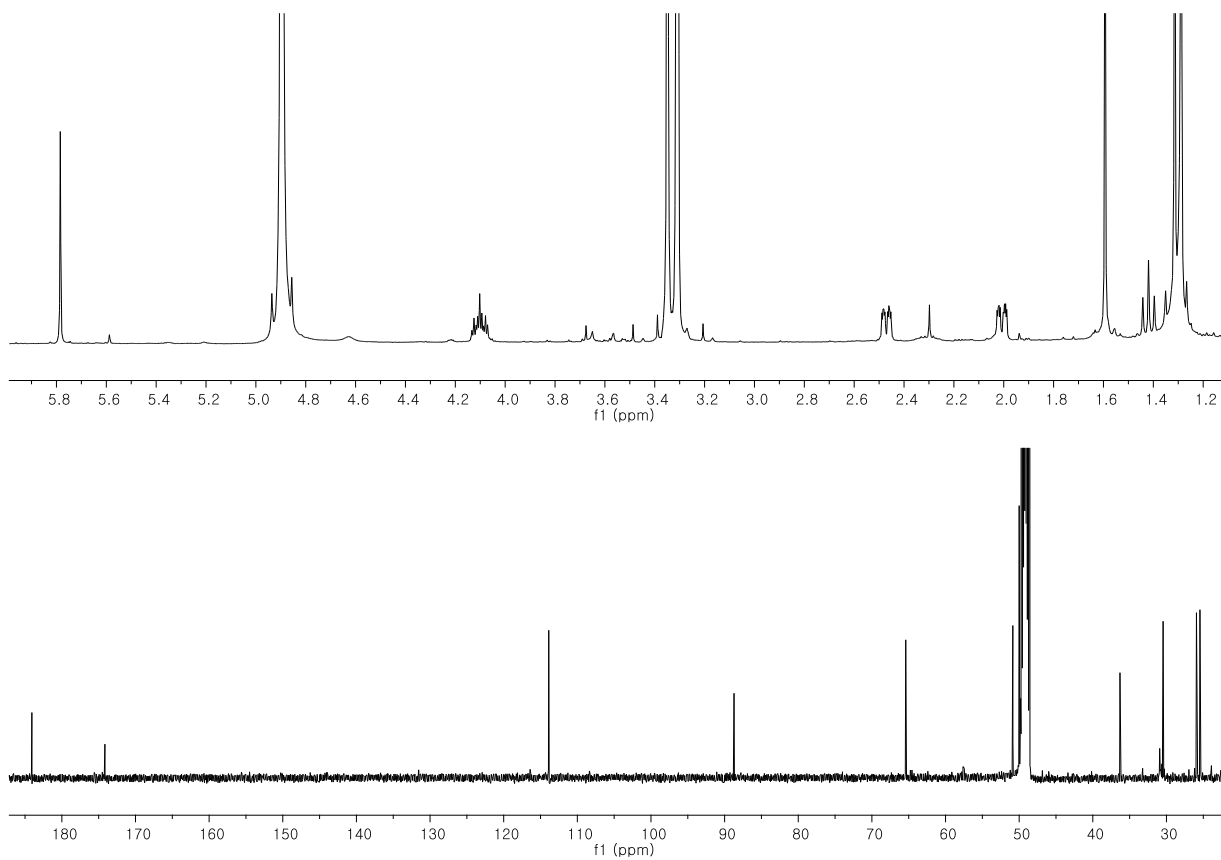


Fig. S119. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **40**

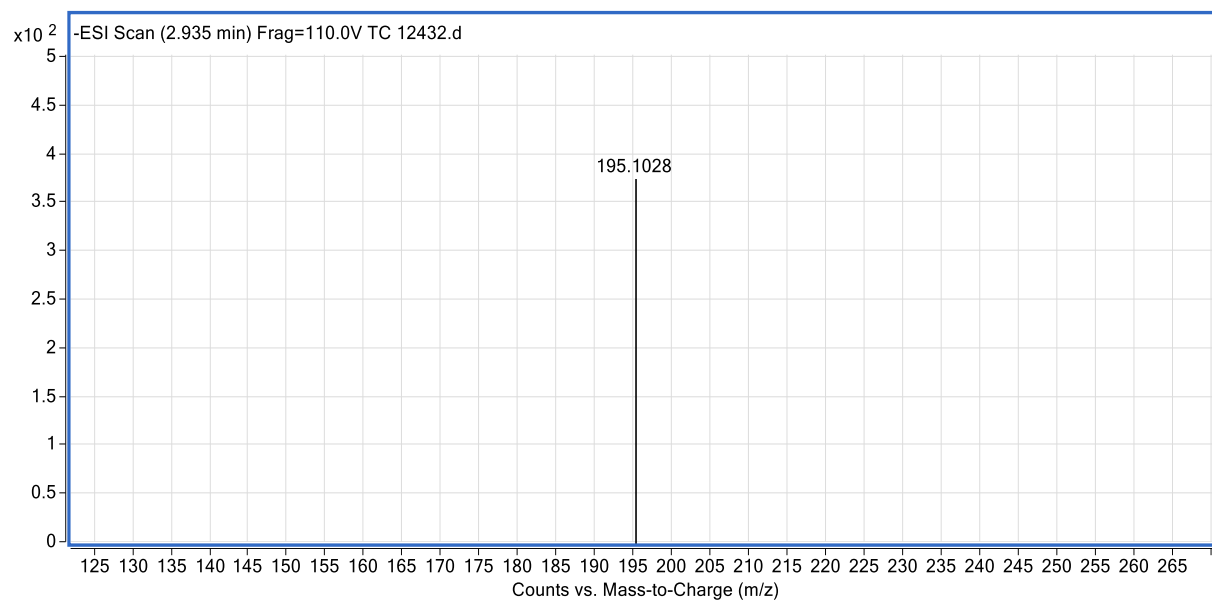


Fig. S120. MS spectrum of compound **40**

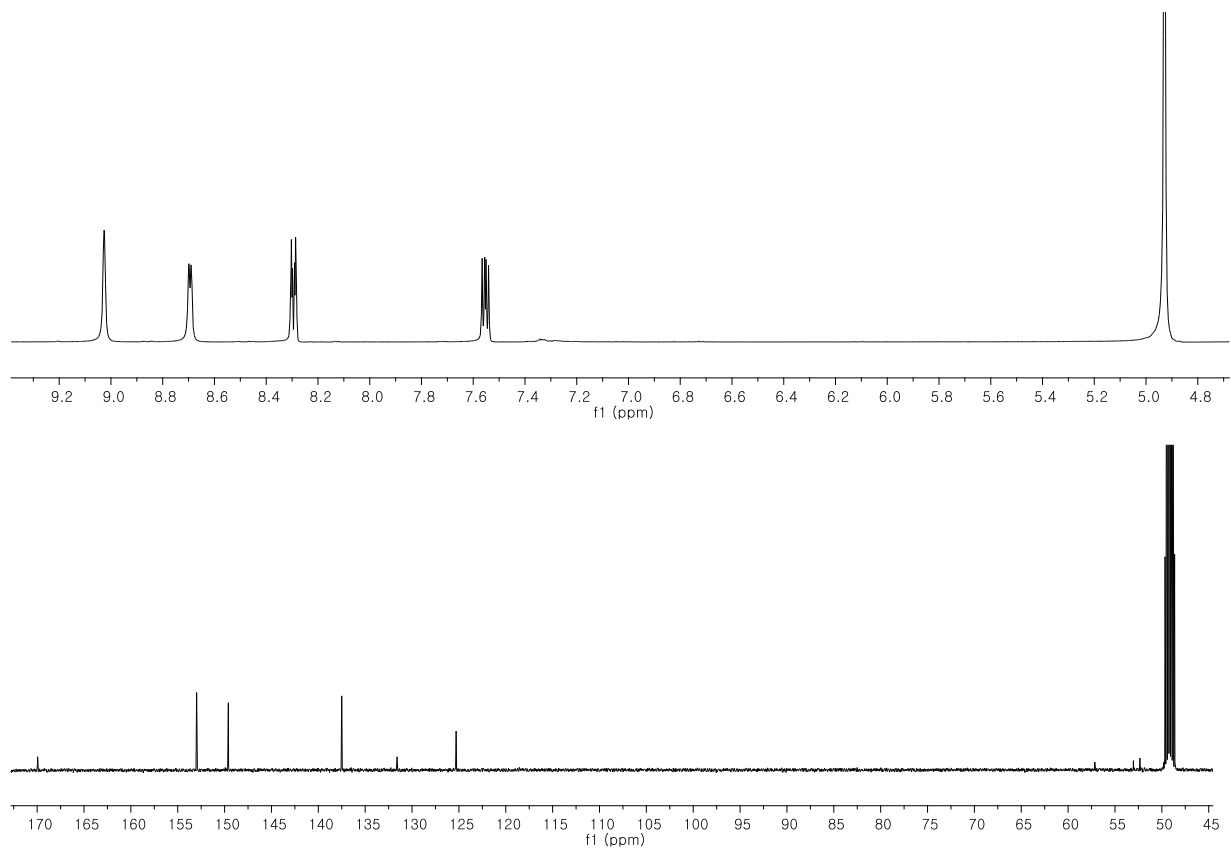


Fig. S121. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **41**

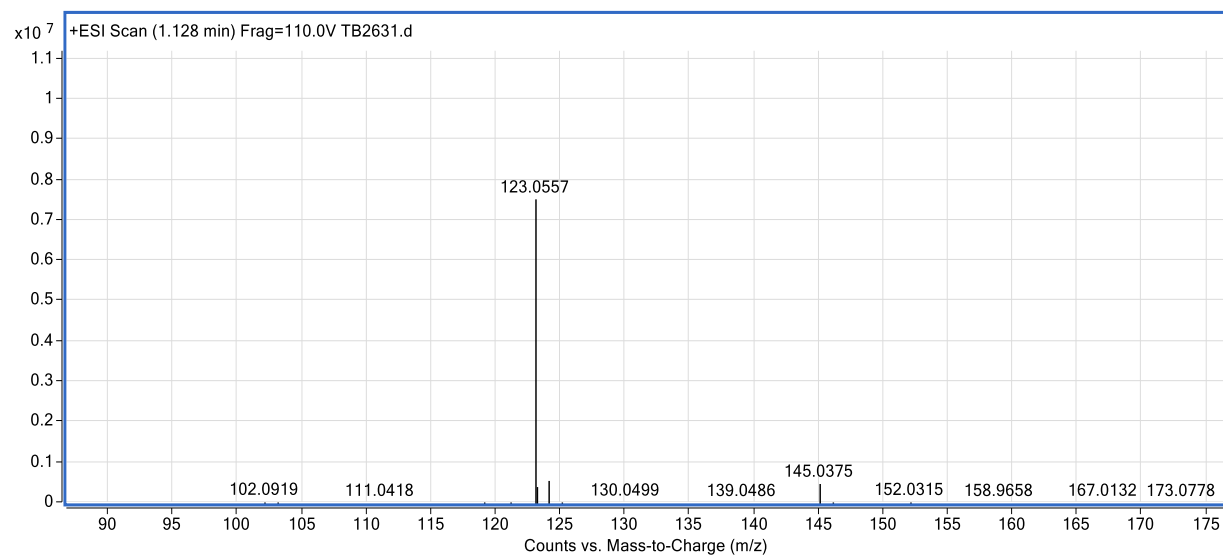


Fig. S122. MS spectrum of compound **41**

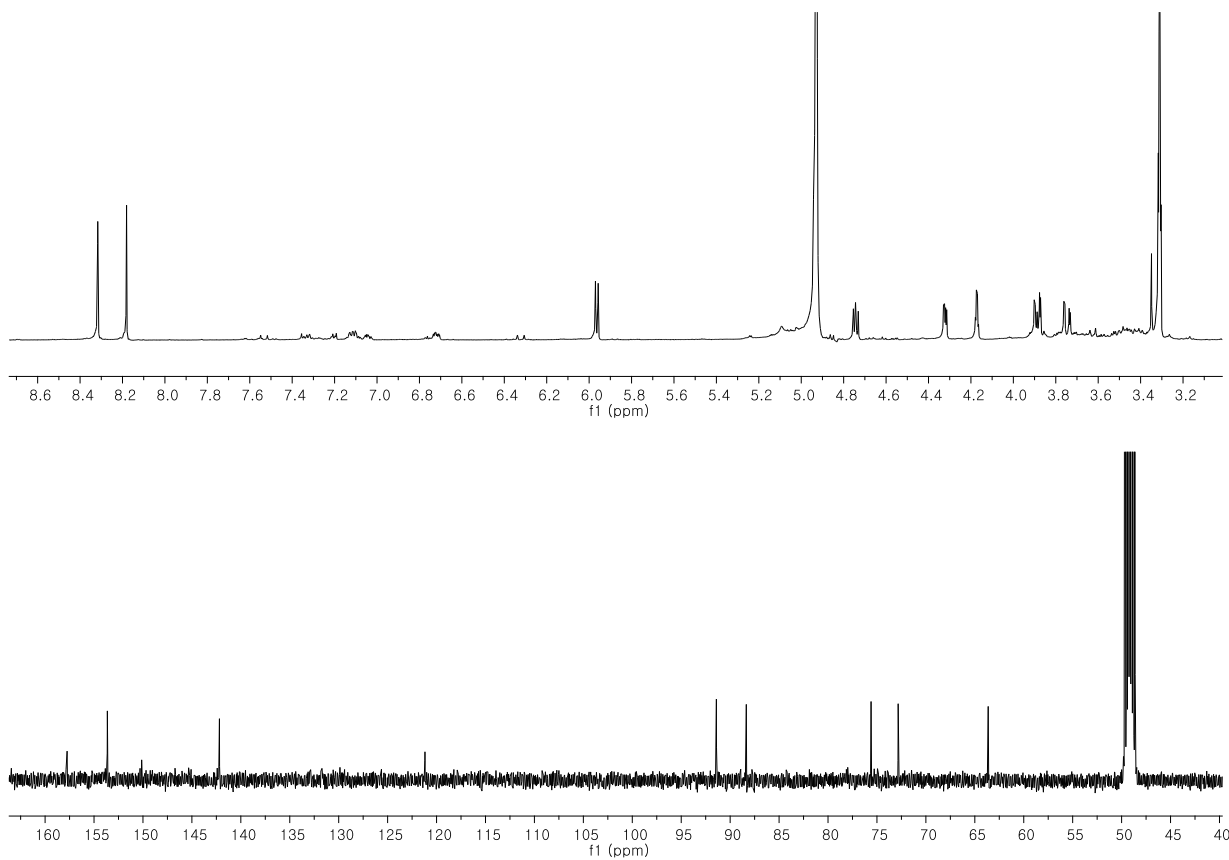


Fig. S123. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **42**

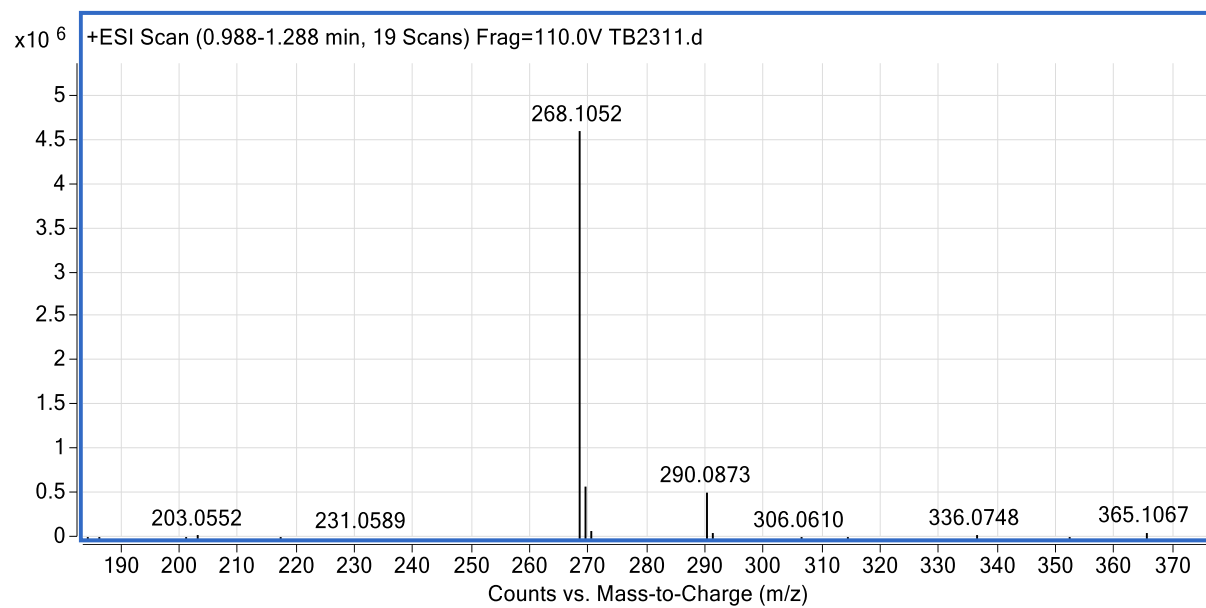


Fig. S124. MS spectrum of compound **42**

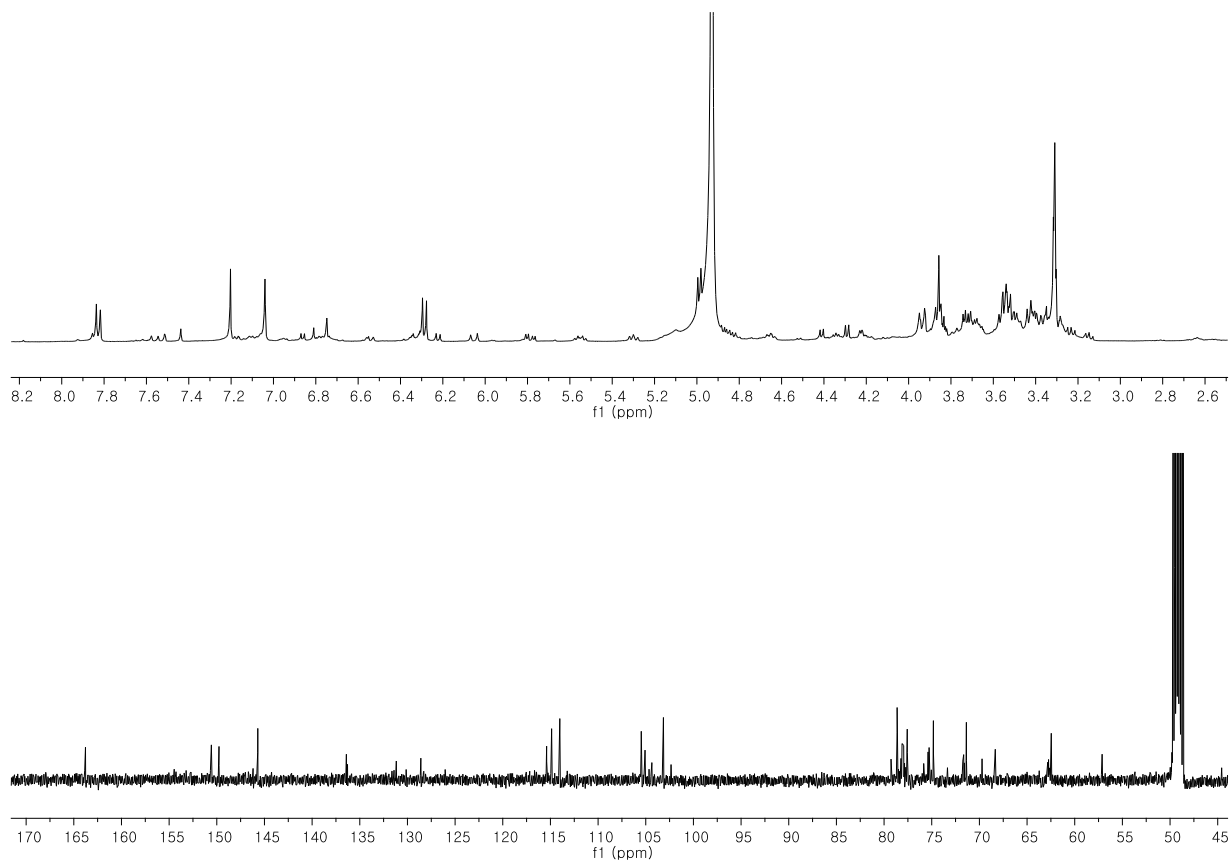


Fig. S125. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **43**

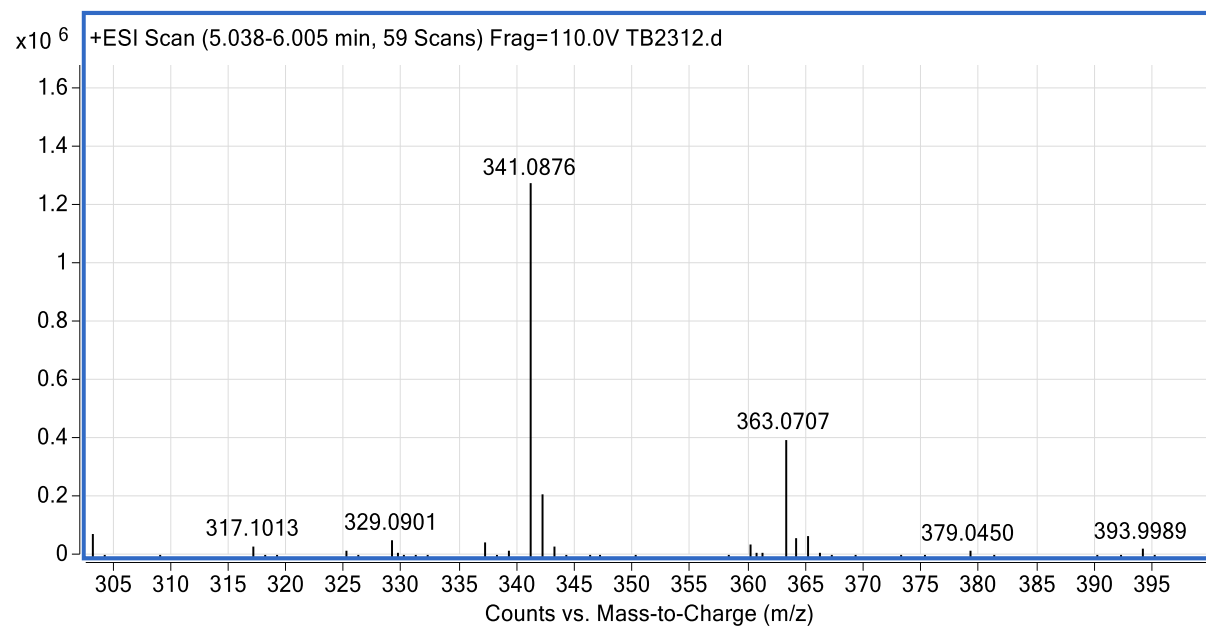


Fig. S126. MS spectrum of compound **43**

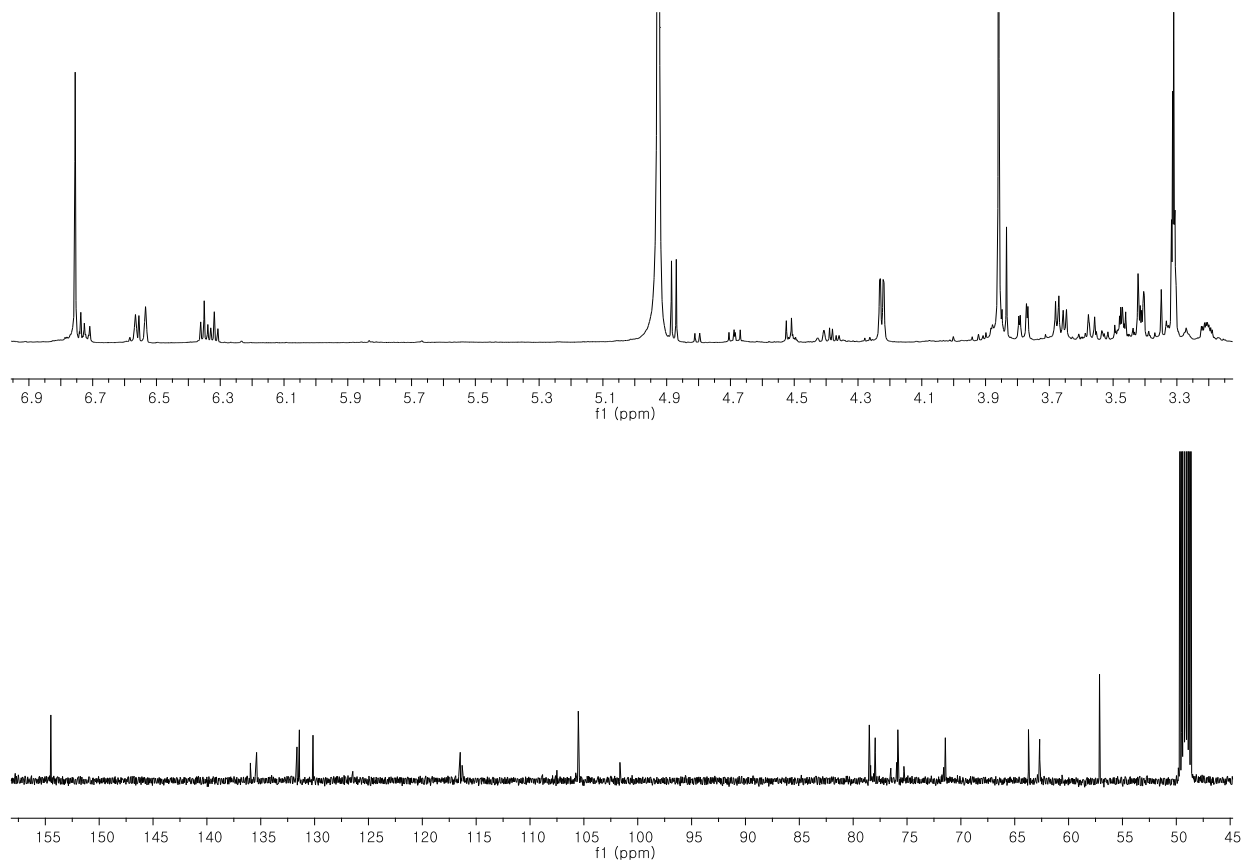


Fig. S127. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **44**

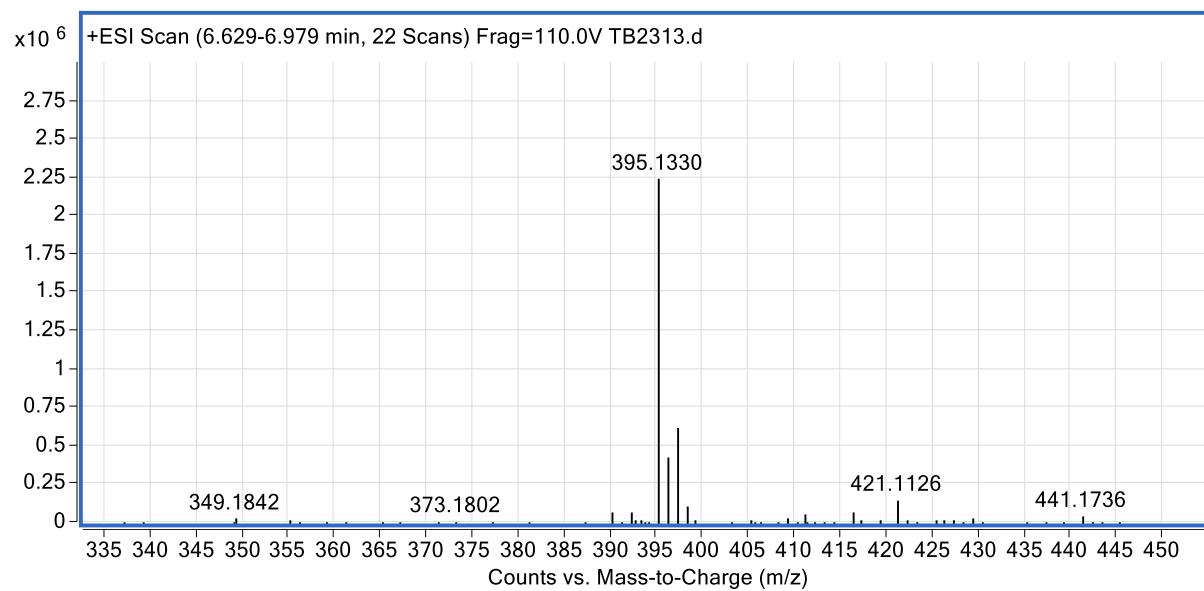


Fig. S128. MS spectrum of compound **44**

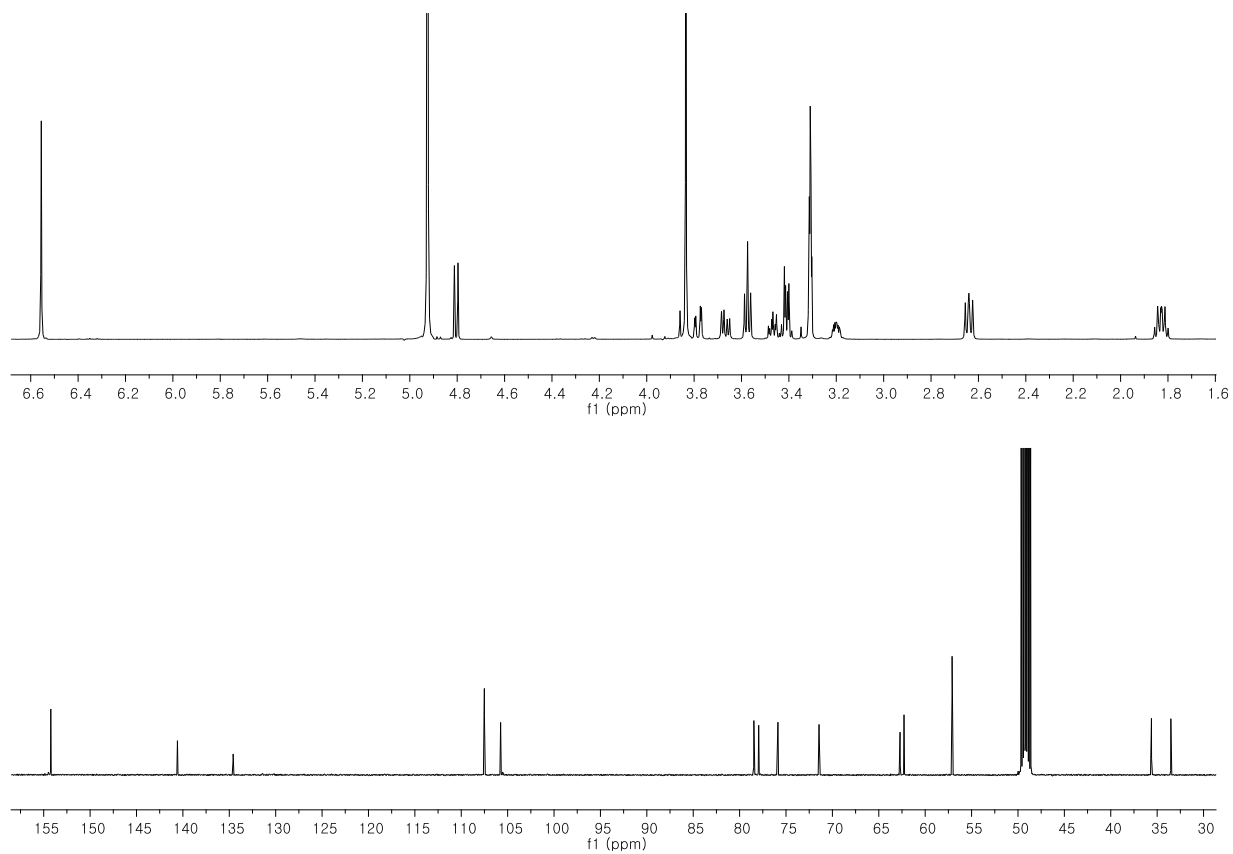


Fig. S129. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **45**

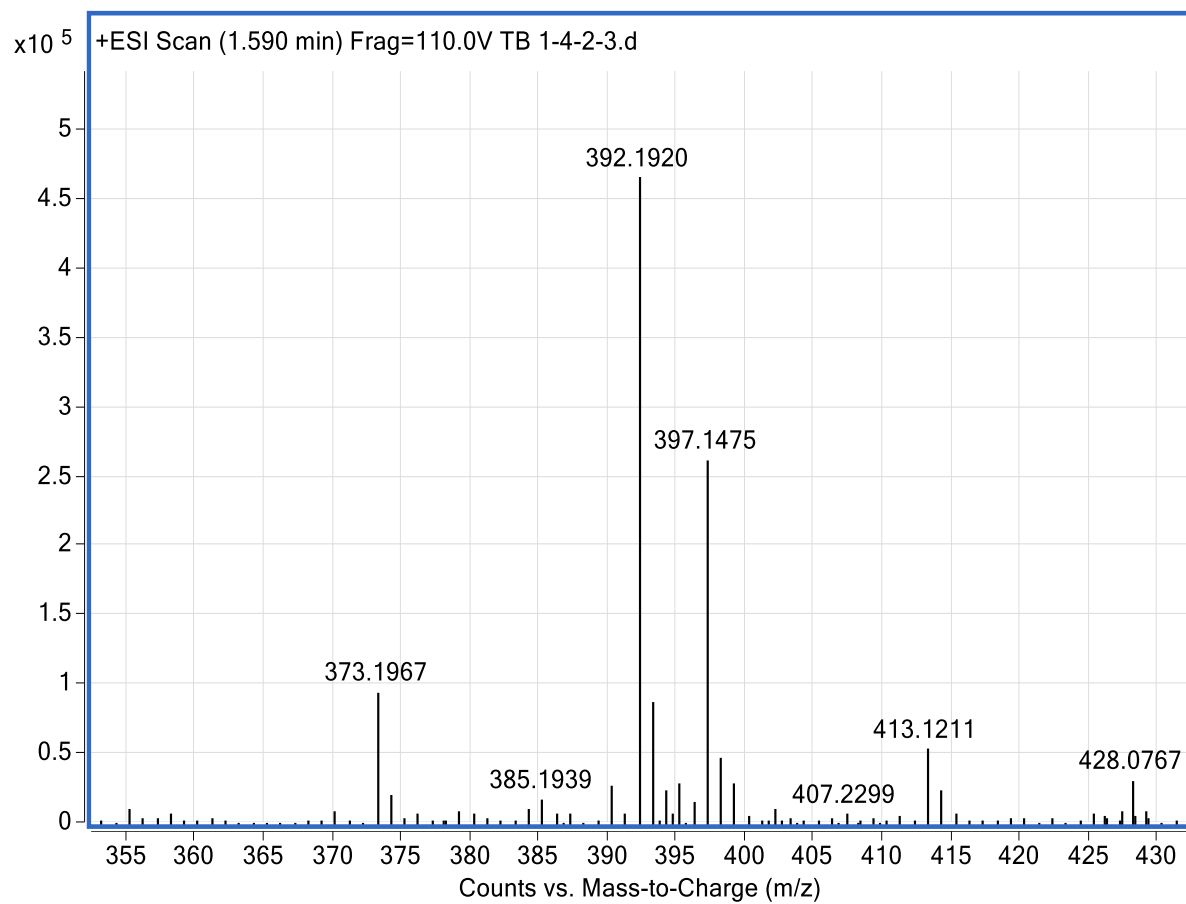


Fig. S130. MS spectrum of compound **45**

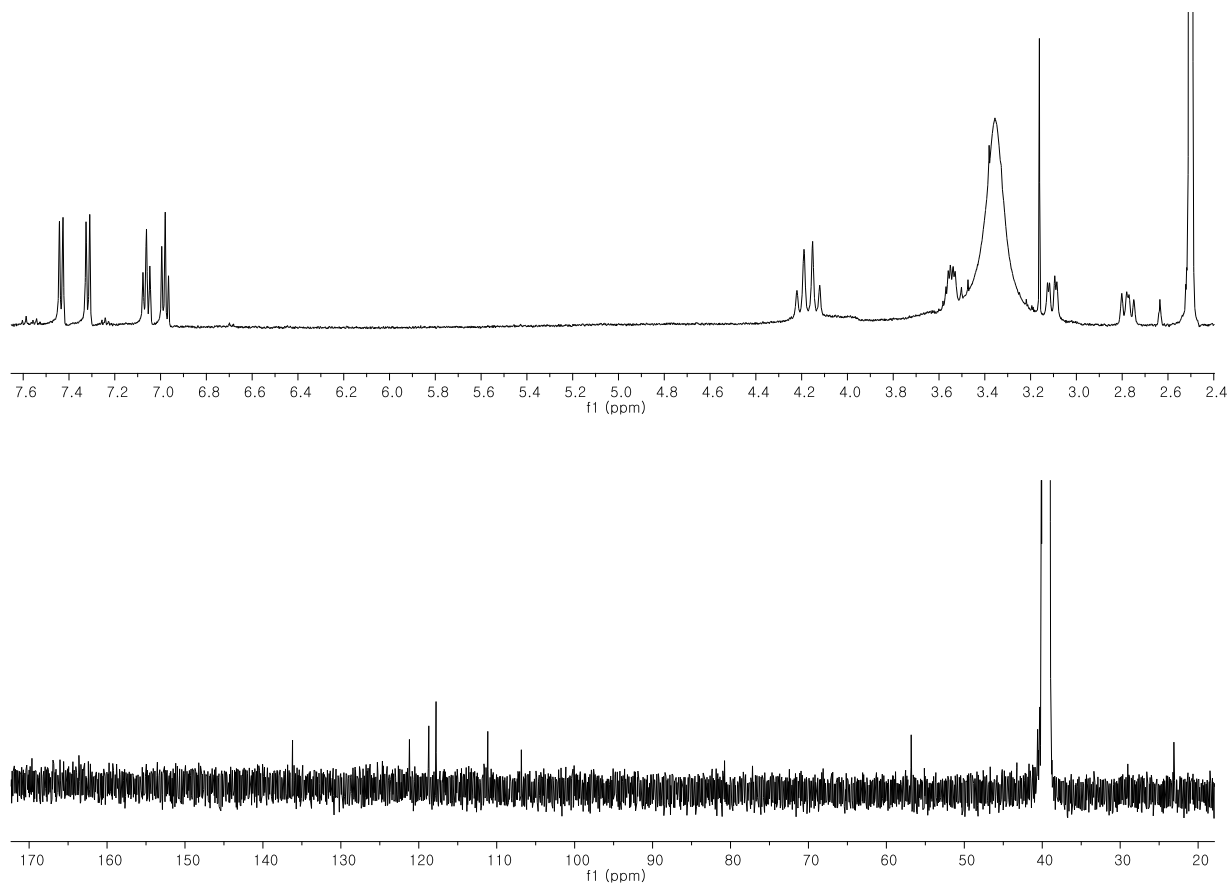


Fig. S131. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **46**

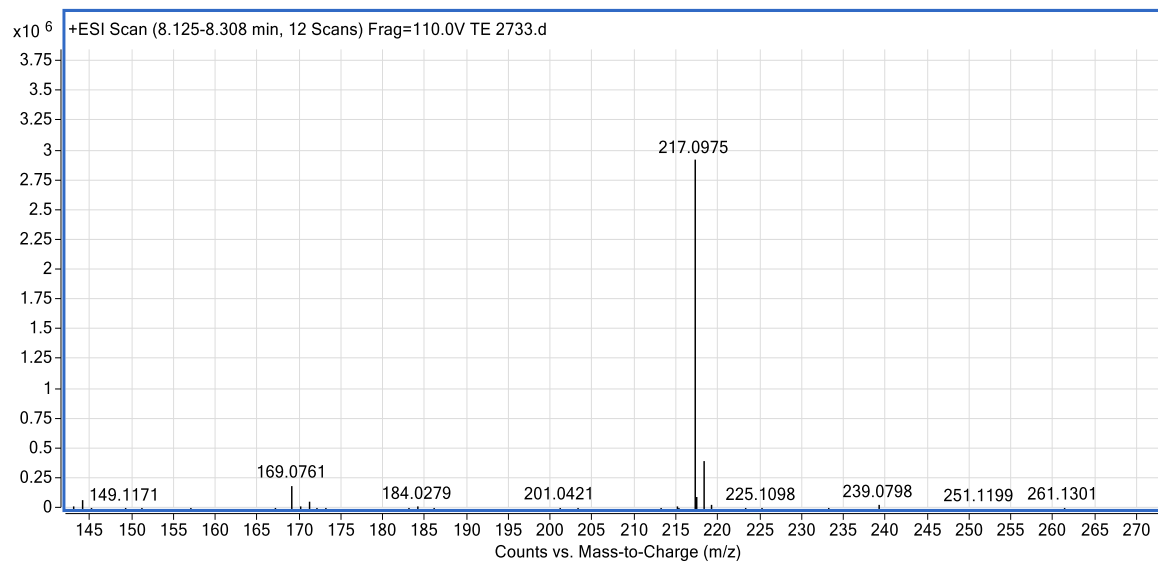


Fig. S132. MS spectrum of compound **46**

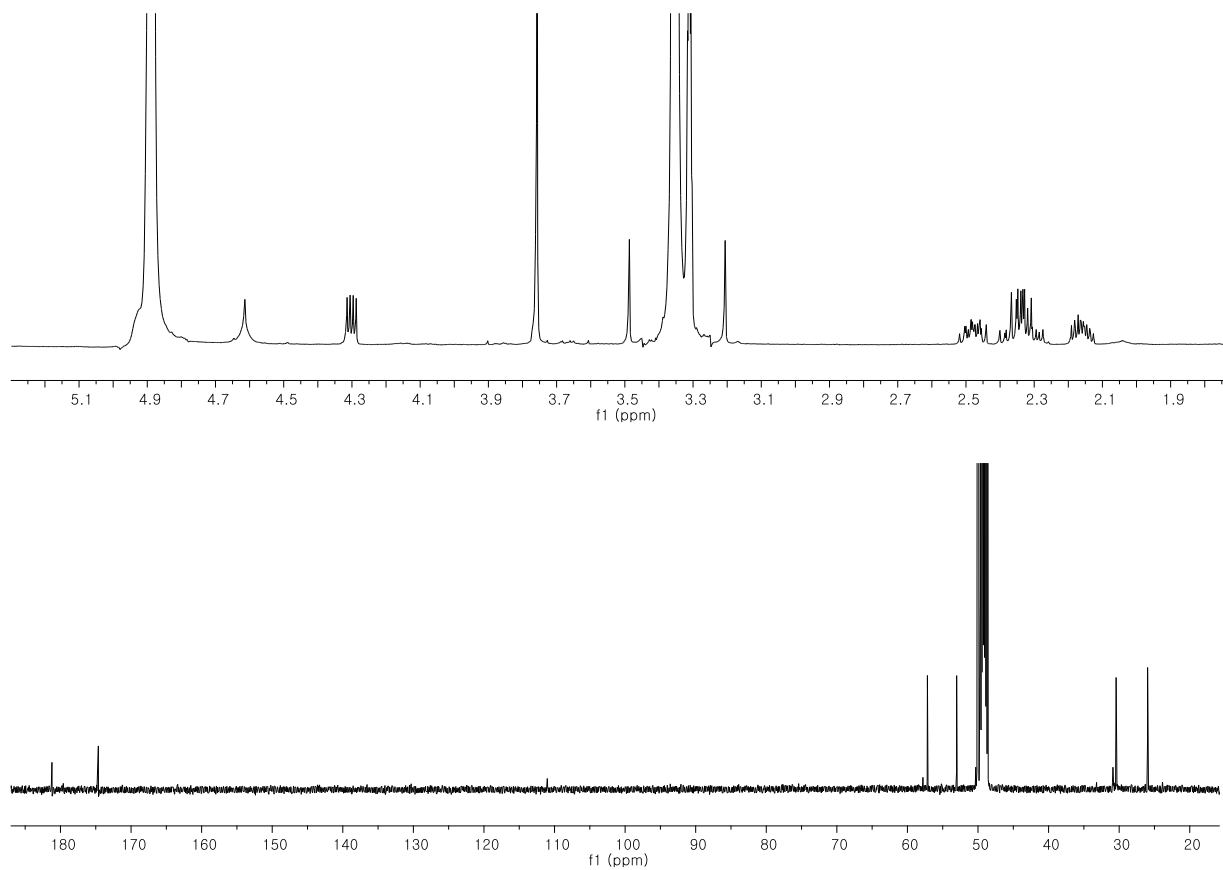


Fig. S133. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **47**

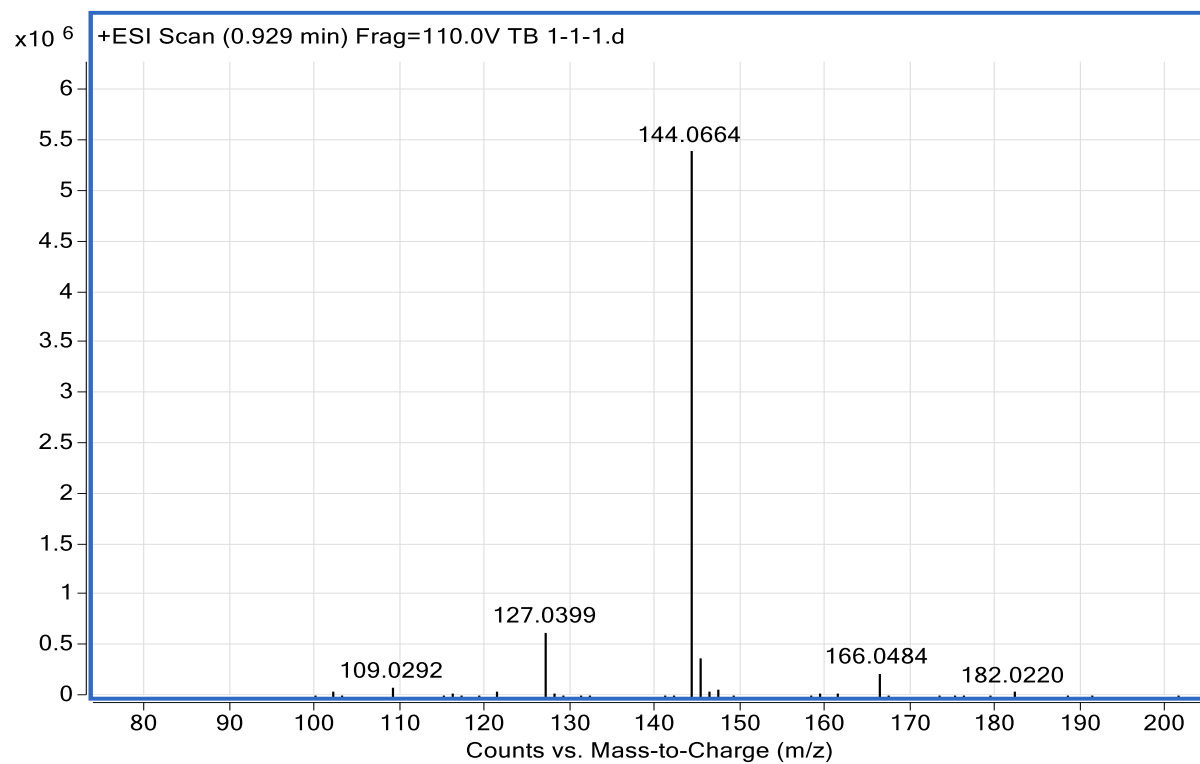


Fig. S134. MS spectrum of compound **47**

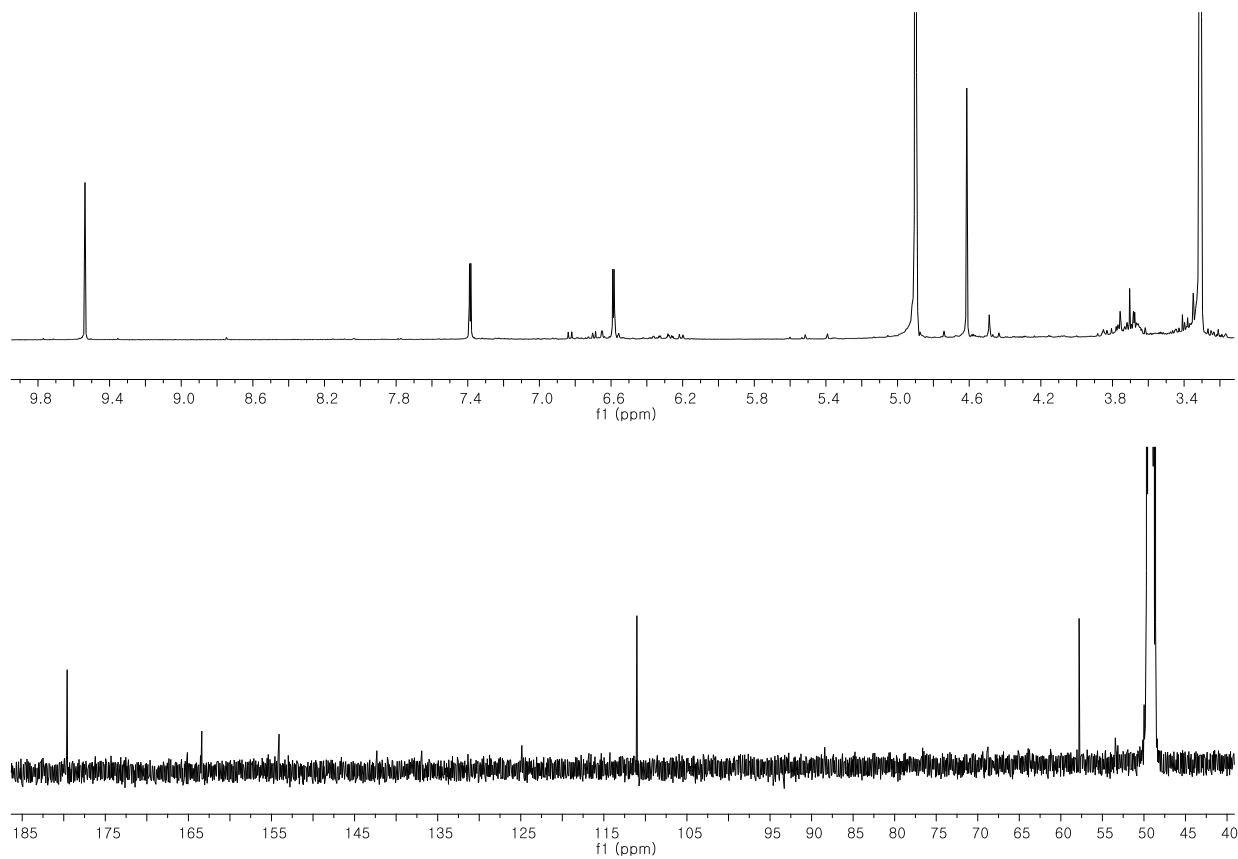


Fig. S135. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **48**

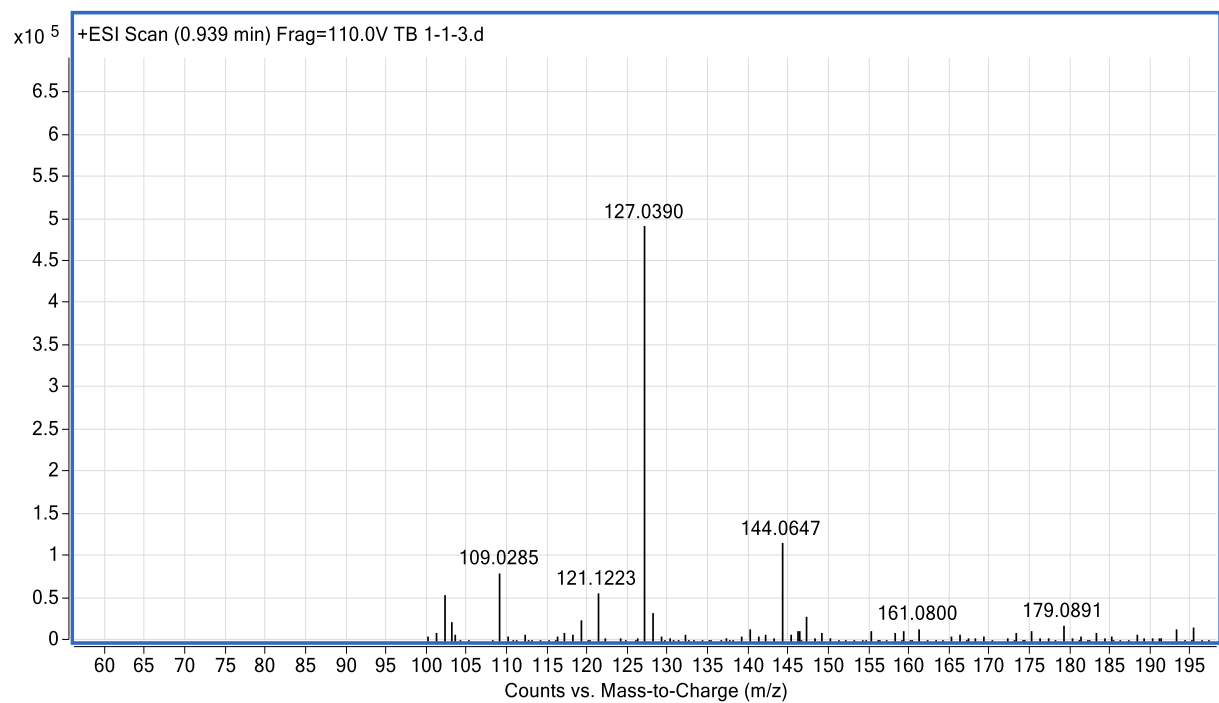


Fig. S136. MS spectrum of compound **48**

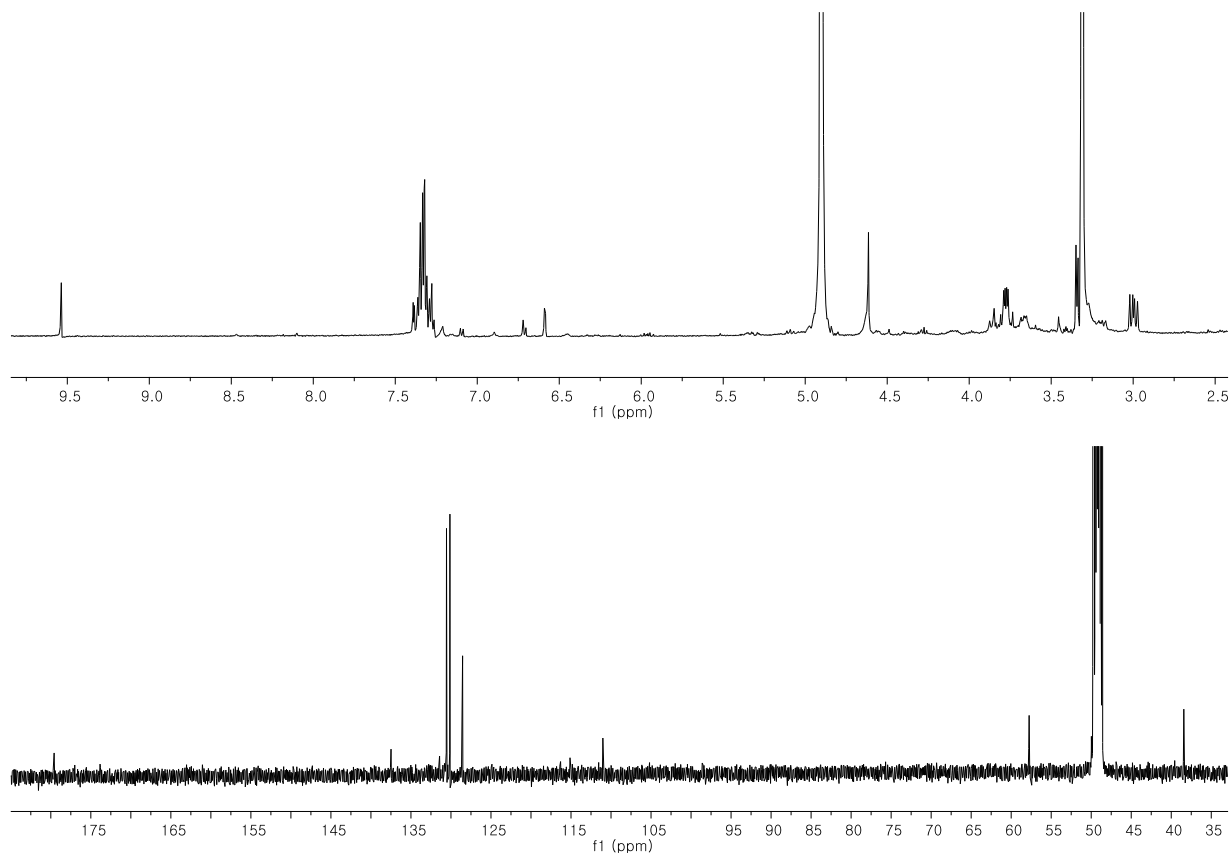


Fig. S137. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **49**

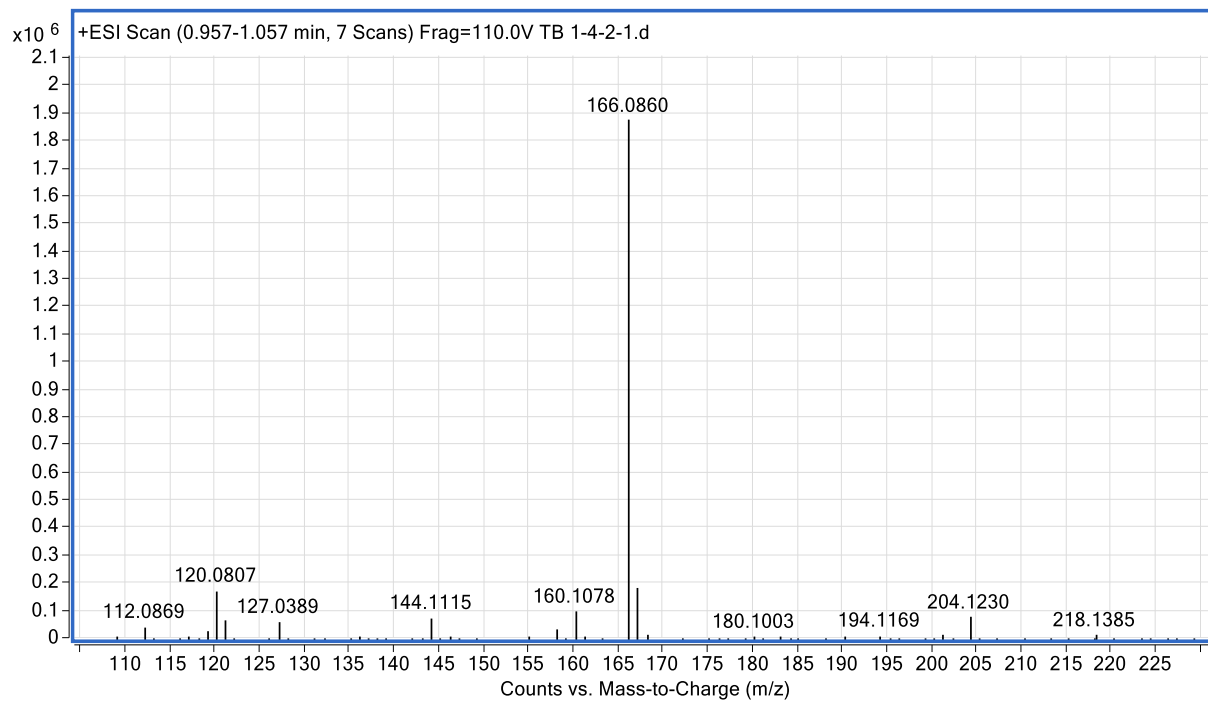


Fig. S138. MS spectrum of compound **49**



저작자표시-비영리-변경금지 2.0 대한민국

이용자는 아래의 조건을 따르는 경우에 한하여 자유롭게

- 이 저작물을 복제, 배포, 전송, 전시, 공연 및 방송할 수 있습니다.

다음과 같은 조건을 따라야 합니다:



저작자표시. 귀하는 원저작자를 표시하여야 합니다.



비영리. 귀하는 이 저작물을 영리 목적으로 이용할 수 없습니다.



변경금지. 귀하는 이 저작물을 개작, 변형 또는 가공할 수 없습니다.

- 귀하는, 이 저작물의 재이용이나 배포의 경우, 이 저작물에 적용된 이용허락조건을 명확하게 나타내어야 합니다.
- 저작권자로부터 별도의 허가를 받으면 이러한 조건들은 적용되지 않습니다.

저작권법에 따른 이용자의 권리는 위의 내용에 의하여 영향을 받지 않습니다.

이것은 [이용허락규약\(Legal Code\)](#)을 이해하기 쉽게 요약한 것입니다.

[Disclaimer](#)

약학박사 학위논문

포공영의 화학성분 및 알파글루코시데이즈

억제 활성

**Chemical Constituents from *Taraxacum officinale* and
Their α -Glucosidase Inhibitory Activity**

2018년 2월

서울대학교 大學院

藥學科 生藥學 專攻

崔 長 圭

목차

I. 서론	3
1. 연구의 배경.....	3
1.1 당뇨병과 치료법.....	3
1.2 포공영 (Taraxaci Herba)	6
1.3 민들레속 식물의 식물화학적 연구.....	8
1.3.1. Sesquiterpene	8
1.3.2. Triterpene	10
1.3.3. 페놀성 화합물.....	11
1.3.4. Inositol	13
1.3.5. 기타 화합물.....	15
2. 연구의 목적.....	16
II. 실험 재료 및 방법	19
1. 재료	19
2. 방법	21
2.1 추출 및 분획.....	21
2.2 분리 및 정제.....	22
2.3 알파글루코시데이즈 억제 활성	59
III. 결과 및 고찰.....	60
1. 화합물 구조동정.....	60
1.1 화합물 1의 구조	60
1.2 화합물 2의 구조	67
1.3 화합물 3의 구조	74

1.4	화합물 4의 구조	80
1.5	화합물 5의 구조	87
1.6	화합물 6의 구조	94
1.7	화합물 7의 구조	100
1.8	화합물 8의 구조	108
1.9	화합물 9의 구조	115
1.10	화합물 10의 구조	123
1.11	화합물 11의 구조	126
1.12	화합물 12의 구조	129
1.13	화합물 13의 구조	132
1.14	화합물 14의 구조	135
1.15	화합물 15의 구조	138
1.16	화합물 16, 17, 18, 19의 구조	144
1.17	화합물 20, 23의 구조	154
1.18	화합물 21, 22의 구조	160
1.19	화합물 24의 구조	166
1.20	화합물 25, 26, 27, 28의 구조	169
1.21	화합물 29, 30의 구조	179
1.22	화합물 31의 구조	185
1.23	화합물 32, 33의 구조	188
1.24	화합물 34, 35, 36의 구조	194
1.25	화합물 37, 48의 구조	202
1.26	화합물 39, 40의 구조	207

1.27 화합물 43의 구조	213
1.28 화합물 44, 45의 구조	216
1.29 화합물 38, 41, 42, 46, 47, 49의 구조.....	221
2. 알파글루코시데이즈 억제활성.....	238
2.1 알파글루코시데이즈 억제활성	238
2.2 알파글루코시데이즈 억제유형	240
IV. 결론.....	241
V. 참고문헌.....	242
국문초록.....	254
부록	257

List of schemes

Scheme 1. Extraction and fractionation of <i>T. officinale</i>	21
Scheme 2. Isolation of compounds from the CHCl ₃ soluble extract of <i>T. officinale</i>	24
Scheme 3. Isolation of compounds from the EA soluble extract of <i>T. officinale</i> ..	26
Scheme 4. Isolation of compounds from the BuOH soluble extract of <i>T. officinale</i>	29

List of tables

Table 1. Classification for the anti-diabetes agents.	5
Table 2. Pharmacological studies reported in the genus <i>Taraxacum</i>	7
Table 3. ¹ H NMR data of inositols.	14
Table 4. Chemical constituents from <i>Taraxacum officinale</i> related with antidiabetes action.	17
Table 5. ¹ H NMR (500 MHz) data of butyrolactone and butanoate derivatives ...	45
Table 6. ¹³ C NMR (125 MHz) data of butyrolactone and butanoate derivatives ..	46
Table 7. ¹ H NMR (500 MHz) data of inositol derivatives	47
Table 8. ¹³ C NMR (125 MHz) data of inositol derivatives	48
Table 9 ¹ H NMR (500 MHz) data of flavonoids	49
Table 10. ¹³ C NMR (125 MHz) data of flavonoids	49
Table 11. ¹ H NMR (500 MHz) data of flavonoids	50
Table 12. ¹³ C NMR (125 MHz) data of flavonoid derivatives	51
Table 13 . ¹ H NMR (500 MHz) data of flavonoid glycosides	52
Table 14. ¹³ C NMR (125 MHz) data of flavonoid glycosides	53
Table 15. ¹ H NMR (500 MHz) data of megastigmane and sesquiterpene derivatives	54
Table 16. ¹³ C NMR (125 MHz) data of megastigmane and sesquiterpene derivatives	55
Table 17. ¹ H NMR (500 MHz) data of others (1).....	56
Table 18. ¹³ C NMR (125 MHz) data of others (1).....	57
Table 19. ¹ H NMR (125 MHz) data of others (2).....	58
Table 20. ¹³ C NMR (125 MHz) data of others (2).....	59

List of figures

Fig. 1-1. Structure of sesquiterpenes reported in the genus <i>Taraxacum</i>	9
Fig. 1-2. Structure of triterpenes reported in the genus <i>Taraxacum</i>	11
Fig. 2-1. Structure of phenolic derivatives reported in the genus <i>Taraxacum</i>	12
Fig. 2-2. Structure of inositol derivatives reported in the genus <i>Taraxacum</i>	14
Fig. 2-3. Structure of miscellaneous compounds reported in the genus <i>Taraxacum</i>	16
Fig. 3. Structure of basic inositols	13
Fig. 4. ¹ H-NMR spectrum of compound 1	63
Fig. 5. ¹³ C-NMR spectrum of compound 1	64
Fig. 6. ¹ H- ¹ H COSY spectrum of compound 1	65
Fig. 7. HSQC spectrum of compound 1	66
Fig. 8. HMBC spectrum of compound 1	67
Fig. 9. ¹ H-NMR spectrum of compound 2	70
Fig. 10. ¹³ C-NMR spectrum of compound 2	71
Fig. 11. ¹ H- ¹ H COSY spectrum of compound 2	72
Fig. 12. HSQC spectrum of compound 2	73
Fig. 13. HMBC spectrum of compound 2	74
Fig. 14. ¹ H-NMR spectrum of compound 3	76
Fig. 15. ¹³ C-NMR spectrum of compound 3	77
Fig. 16. ¹ H- ¹ H COSY spectrum of compound 3	78
Fig. 17. HSQC spectrum of compound 3	79
Fig. 18. HMBC spectrum of compound 3	80
Fig. 19. ¹ H-NMR spectrum of compound 4	83
Fig. 20. ¹³ C-NMR spectrum of compound 4	84
Fig. 21. ¹ H- ¹ H COSY spectrum of compound 4	85
Fig. 22. HSQC spectrum of compound 4	86
Fig. 23. HMBC spectrum of compound 4	87
Fig. 24. ¹ H-NMR spectrum of compound 5	90
Fig. 25. ¹³ C-NMR spectrum of compound 5	91

Fig. 26. ^1H - ^1H COSY spectrum of compound 5	92
Fig. 27. HSQC spectrum of compound 5	93
Fig. 28. HMBC spectrum of compound 5	94
Fig. 29. ^1H -NMR spectrum of compound 6	96
Fig. 30. ^{13}C -NMR spectrum of compound 6	97
Fig. 31. ^1H - ^1H COSY spectrum of compound 6	98
Fig. 32. HSQC spectrum of compound 6	99
Fig. 33. HMBC spectrum of compound 6	100
Fig. 34. ^1H -NMR spectrum of compound 7	103
Fig. 35. ^{13}C -NMR spectrum of compound 7	104
Fig. 36. ^1H - ^1H COSY spectrum of compound 7	105
Fig. 37. HSQC spectrum of compound 7	106
Fig. 38. HMBC spectrum of compound 7	107
Fig. 39. ^1H -NMR spectra of inositol of 7 and <i>chiro</i> -inositol standard	108
Fig. 40. ^1H -NMR spectrum of compound 8	110
Fig. 41. ^{13}C -NMR spectrum of compound 8	111
Fig. 42. ^1H - ^1H COSY spectrum of compound 8	112
Fig. 43. HSQC spectrum of compound 8	113
Fig. 44. HMBC spectrum of compound 8	114
Fig. 45. ^1H -NMR spectra of inositol of 8 and <i>chiro</i> -inositol standard	115
Fig. 46. ^1H -NMR spectrum of compound 9	118
Fig. 47. ^{13}C -NMR spectrum of compound 9	119
Fig. 48. ^1H - ^1H COSY spectrum of compound 9	120
Fig. 49. HSQC spectrum of compound 9	121
Fig. 50. HMBC spectrum of compound 9	122
Fig. 51. ^1H -NMR spectra of inositol of 9 and <i>chiro</i> -inositol standard	123
Fig. 52. ^1H -NMR spectrum of compound 10	125
Fig. 53. ^{13}C -NMR spectrum of compound 10	126
Fig. 54. ^1H -NMR spectrum of compound 11	128
Fig. 55. ^{13}C -NMR spectrum of compound 11	129
Fig. 56. ^1H -NMR spectrum of compound 12	131

Fig. 57. ^{13}C -NMR spectrum of compound 12	132
Fig. 58. ^1H -NMR spectrum of compound 13	134
Fig. 59. ^{13}C -NMR spectrum of compound 13	135
Fig. 60. ^1H -NMR spectrum of compound 14	137
Fig. 61. ^{13}C -NMR spectrum of compound 14	138
Fig. 62. ^1H -NMR spectrum of compound 15	140
Fig. 63. ^{13}C -NMR spectrum of compound 15	141
Fig. 64. ^1H - ^1H COSY spectrum of compound 15	142
Fig. 65. HSQC spectrum of compound 15	143
Fig. 66. HMBC spectrum of compound 15	144
Fig. 67. ^1H -NMR spectrum of compound 16	147
Fig. 68. ^{13}C -NMR spectrum of compound 16	148
Fig. 69. ^1H -NMR spectrum of compound 17	149
Fig. 70. ^{13}C -NMR spectrum of compound 17	150
Fig. 71. ^1H -NMR spectrum of compound 18	151
Fig. 72. ^{13}C -NMR spectrum of compound 18	152
Fig. 73. ^1H -NMR spectrum of compound 19	153
Fig. 74. ^{13}C -NMR spectrum of compound 19	154
Fig. 75. ^1H -NMR spectrum of compound 20	157
Fig. 76. ^{13}C -NMR spectrum of compound 20	158
Fig. 77. ^1H -NMR spectrum of compound 23	159
Fig. 78. ^{13}C -NMR spectrum of compound 23	160
Fig. 79. ^1H -NMR spectrum of compound 21	163
Fig. 80. ^{13}C -NMR spectrum of compound 21	164
Fig. 81. ^1H -NMR spectrum of compound 22	165
Fig. 82. ^{13}C -NMR spectrum of compound 22	166
Fig. 83. ^1H -NMR spectrum of compound 24	168
Fig. 84. ^{13}C -NMR spectrum of compound 24	169
Fig. 85. ^1H -NMR spectrum of compound 25	172
Fig. 86. ^{13}C -NMR spectrum of compound 25	173
Fig. 87. ^1H -NMR spectrum of compound 26	174

Fig. 88. ^{13}C -NMR spectrum of compound 26	175
Fig. 89. ^1H -NMR spectrum of compound 27	176
Fig. 90. ^{13}C -NMR spectrum of compound 27	177
Fig. 91. ^1H -NMR spectrum of compound 28	178
Fig. 92. ^{13}C -NMR spectrum of compound 28	179
Fig. 93. ^1H -NMR spectrum of compound 29	182
Fig. 94. ^{13}C -NMR spectrum of compound 29	183
Fig. 95. ^1H -NMR spectrum of compound 30	184
Fig. 96. ^{13}C -NMR spectrum of compound 30	185
Fig. 97. ^1H -NMR spectrum of compound 31	187
Fig. 98. ^{13}C -NMR spectrum of compound 31	188
Fig. 99. ^1H -NMR spectrum of compound 32	191
Fig. 100. ^{13}C -NMR spectrum of compound 32	192
Fig. 101. ^1H -NMR spectrum of compound 33	193
Fig. 102. ^{13}C -NMR spectrum of compound 33	194
Fig. 103. ^1H -NMR spectrum of compound 34	197
Fig. 104. ^{13}C -NMR spectrum of compound 34	198
Fig. 105. ^1H -NMR spectrum of compound 35	199
Fig. 106. ^{13}C -NMR spectrum of compound 35	200
Fig. 107. ^1H -NMR spectrum of compound 36	201
Fig. 108. ^{13}C -NMR spectrum of compound 36	202
Fig. 109. ^1H -NMR spectrum of compound 37	204
Fig. 110. ^{13}C -NMR spectrum of compound 37	205
Fig. 111. ^1H -NMR spectrum of compound 48	206
Fig. 112. ^{13}C -NMR spectrum of compound 48	207
Fig. 113. ^1H -NMR spectrum of compound 39	210
Fig. 114. ^{13}C -NMR spectrum of compound 39	211
Fig. 115. ^1H -NMR spectrum of compound 40	212
Fig. 116. ^{13}C -NMR spectrum of compound 40	213
Fig. 117. ^1H -NMR spectrum of compound 43	215
Fig. 118. ^{13}C -NMR spectrum of compound 43	216

Fig. 119. ^1H -NMR spectrum of compound 44	218
Fig. 120. ^{13}C -NMR spectrum of compound 44	219
Fig. 121. ^1H -NMR spectrum of compound 45	220
Fig. 122. ^{13}C -NMR spectrum of compound 45	221
Fig. 123. ^1H -NMR spectrum of compound 38	225
Fig. 124. ^{13}C -NMR spectrum of compound 38	226
Fig. 125. ^1H -NMR spectrum of compound 41	227
Fig. 126. ^{13}C -NMR spectrum of compound 41	228
Fig. 127. ^1H -NMR spectrum of compound 42	229
Fig. 128. ^{13}C -NMR spectrum of compound 42	230
Fig. 129. ^1H -NMR spectrum of compound 46	231
Fig. 130. ^{13}C -NMR spectrum of compound 46	232
Fig. 131. ^1H -NMR spectrum of compound 47	233
Fig. 132. ^{13}C -NMR spectrum of compound 47	234
Fig. 133. ^1H -NMR spectrum of compound 49	235
Fig. 134. ^{13}C -NMR spectrum of compound 49	236
Fig. 135. Isolated compounds from <i>T. officinale</i> (continued)	237
Fig. 136. Isolated compounds from <i>T. officinale</i>	238
Fig. 137. Lineweaver-Burk plots for the inhibition of α -glucosidase in the compound 2 , 9 , 10 , 11 , 19 , 24 and acarbose	241

List of abbreviations

$[\alpha]_D$: specific optical rotation

C.C: column chromatography

CD: circular dichroism

CHCl_3 : chloroform

COSY: correlation spectroscopy

d: doublet

DMSO: dimethyl sulfoxide

EA: ethyl acetate

HMBC: heteronuclear multiple bond correlation

HPLC: high performance liquid chromatography

HSQC: heteronuclear single quantum coherence

HRESIMS: high resolution electrospray ionization mass

Hz: hertz

IC_{50} : the half maximal inhibitory concentration

m: multiplet

MeCN: acetonitrile

MeOH: methanol

MTPA: α -methoxy- α -trifluoromethylphenylacetyl

n-BuOH: *n*-butanol

NMR: nuclear magnetic resonance

PBS: phosphate-buffered saline

Q-TOF: quadrupole-time of flight

RP: reversed phase

s: singlet

t: triplet

UV: ultraviolet

I. 서론

1. 연구의 배경

1.1 당뇨병과 치료법

당뇨(糖尿)란 혈액중의 포도당이 소변으로 나오기 때문에 붙여진 이름이다. 인간이 섭취한 포도당은 소장에서 흡수가 되어 인슐린에 의해 세포에서 사용된다. 인슐린 분비가 제대로 되지 않거나, 제 기능을 하지 못하면서 높은 혈당수치가 지속되는 대사질환을 당뇨병이라 한다 (Kim et al., 2017). 이 대사성질환은 현대사회의 심각한 건강문제이며, 우리나라도 에너지 과잉섭취, 운동부족, 스트레스 등의 이유로 당뇨병 인구가 크게 증가하고 있다. 당뇨병은 일반적으로 두 가지로 분류할 수 있는데, 제I형 당뇨병은 충분한 인슐린을 생산하지 못하여 발생하며 ‘인슐린의존당뇨병’이라고 부른다. 제II형 당뇨병은 세포가 인슐린에 반응하지 않는 인슐린 저항성에 의해 발생하며 ‘인슐린비의존당뇨병’이라고 부른다. 특히 제II형 당뇨병은 전체 당뇨병환자의 약 90%를 차지하며, 비만, 운동부족 등과 같은 생활방식요소가 발생원인으로 ‘성인당뇨병’이라고도 부른다.

특징	제I형 당뇨병	제II형 당뇨병
발현	급성	점진적
발현 연령	대부분 어린이	대부분 어른
체격	마르거나 보통	종종 비만
자가항체	보통 존재	결여
내인성 인슐린	적거나 결여	보통, 감소
유병률	~10%	~90%

당뇨병의 3 대 증상은 다뇨 (多尿), 다음 (多飲), 다식 (多食) 이다. 고혈당 상태가 지속되면 소변으로 당이 빠져나가게 되고, 이로 인해 수분을 더욱 보충하게 되며, 이로 인한 에너지 부족으로 더욱 많이 먹게 되는 악순환에 빠지게 되는 것이다. 결과적으로 혈관, 신경, 근육등과 같은 여러 장기의 손상을 유발하며, 합병증의 원인이 된다 (Kaltoh et al., 2014, Zhang et al., 2017).

당뇨병 치료방법으로는 인슐린주사와 경구형 약물이 있다. 인슐린주사의 경우 주로 제I형 당뇨병환자와 경구형 약물로 혈당이 조절이 되지 않는 환자가 사용한다. 경구형 약물은 크게 세 종류로 나눌 수 있다 (Table 1.). 인슐린 분비촉진제 (sulfonylurea 와 meglinide 계)는 당뇨에 가장 많이 사용되는 약물이며, 베타세포의 인슐린분비를 촉진 시킴으로써 혈당을 조절한다 (Ripsin et al., 2009, Ikeda et al., 2017). 단점으로는 진단 초기인 환자에게만 효과적이며, 급성저혈당을 유발할 수 있다. 인슐린 저항성을 개선하는 약물로는 근육에서의 당 흡수와 이용을 증가시키는 biguanide 계 약물과 peroxisome proliferators-activated receptor γ 를 자극하여 체내 인슐린 감수성을 향상시키는 thiazolidine 계 약물이 있으나, 이들은 신기능 저하 혹은 부종, 체중증가 등의 심각한 부작용이 있다 (Krentz and Bailey, 2005).

알파글루코시데이즈 억제제는 소장에서 다당류 분해효소를 억제하여 장에서 탄수화물 흡수를 지연시키며, 현재 acarbose 와 voglibose 가 임상으로 쓰이고 있다. 알파글루코시데이즈 억제제의 장점은 식후

혈당조절이 되지 않는 환자에게 효과적으로 사용할 수 있으며, 체중에 영향을 주지 않고 중성지방을 저하시키는 효과가 있다는 점이다 (van de Laar et al., 2005, Satoh et al., 2015, Vichayanrat et al., 2002). 복통, 가스, 설사 등과 같은 소화기 부작용이 있지만, 다른 계열의 약물에 비해 상대적으로 부작용이 가벼운 편이다.

Table 1. Classification for the anti-diabetes agents.

구분	종류	작용기전	일반명
인슐린 분비 촉진	sulfonylurea	이자 β 세포에 결합해서 인슐린 분비를 촉진	glibenclamide
			gliclazide
			glimepiride
	속효형 인슐린 분비 촉진제	이자 β 세포막상의 SU 수용체에 결합해서 인슐린 분비를 촉진(속효성)	nateglinide
			mitiglinide
			calcium hydrate
식후 고혈당 개선	α -glucosidase 억제제	당의 소화를 억제해서 흡수를 지연	acarbose
			voglibose
인슐린 저항성 개선	biguanide 계	간에서 당생성을 억제하여 인슐린 감수성을 개선	metformin
			hydrochloride
			buformin
			hydrochloride
	thiazolidine 계	인슐린 저항성을 개선	pioglitazone
			hydrochloride

1.2 포공영 (*Taraxaci Herba*)

민들레는 다년생 국화과 식물로서, 주로 따뜻한 북반구 쪽에 분포한다 (Kisiel and Michalska, 2005). 뿌리의 길이가 일반적으로 15-30 cm 정도되며, 초록색 잎이 5-40 cm까지 자란다. 두상화서 노란색 꽃이 5-40 cm 길이로 자라며, 일반적으로 한 뿌리에 5-10개의 꽃이 핀다. 꽃잎이 흰색 혹은 갈색 씨앗으로 변하며 바람에 의해 퍼지게 된다.

국내에서는 민들레 (*Taraxacum platycarpum* Dahlst.)와 서양민들레 (*Taraxacum officinale* F.H. Wigg) 두 기원식물이 대부분인데, 특히 서양민들레가 압도적으로 많이 존재한다. 서양민들레는 본래 유럽지역에 많이 분포하며 전통약으로 사용되었으나, 본래 전세계에 분포하는 식물이다. 두 민들레의 외관적 차이로는 총포를 볼 수 있는데 민들레는 총포가 밀착되어 있고 서양민들레는 총포가 젖혀있는 것이 차이점이다.



T. platycarpum



T. officinale

민들레가 약용식물로서 사용된 첫 기록은 10-11세기 아랍지역에서 간과 비장을 치료했다는 기록이 있다 (Sweeny et al., 2005). 16세기부터 본격적으로 유럽지역에서 약용식물로 사용되었으며 주로 위장약, 간장약 등으로 사용되었는데, 특히 꽃 부분이 이담작용으로 뛰어난 효과가

있었다고 한다. 혈관청소, 관절염, 습진 등에도 효능을 보여 평상시에 주스나 식품으로도 섭취하였다 (Weiss and Fintelmann, 2000). 북미지역에서는 민들레 즙을 신장장애, 소화불량 그리고 당뇨병치료에도 사용하였다는 기록이 있다 (Hernandez-Galicia et al., 2002). 중국에서는 전통적으로 간염과 면역력향상을 위해 민들레와 다른 약제들을 조합하여 사용하였다 (Leu et al., 2003, Sweeney et al., 2005). 이와 같은 근거로 민들레의 활성화에 대한 많은 연구가 진행되었고, 그 결과를 table 2.에 정리하였다.

포공영 (蒲公英)은 KHP, CP 등재 생약이며, 민들레 (*T. platycarpum*), 흰민들레 (*T. coreanum* Nakai), 서양민들레 (*T. officinale*)의 전초이다. 맛은苦, 성질이 寒하기 때문에 해열, 발한, 소염, 건위, 이뇨, 최유약으로 전통적으로 사용하였다. 특히 소화불량과 급성 활달성 간염, 급성 편도선염, 급성 유선염에 포공영탕(蒲公英湯)으로 음용하였다.

Table 2. Pharmacological studies reported in the genus *Taraxacum*.

Pharmacological target	Extracts/compounds	Reference
Diuretic activity	aqueous extract	(Racz-Kotilla et al., 1974)
	petrol ether fraction and methanol fractions	(Hook et al., 1993)
Choleretic activity	alcoholic extract	(Bussemaker, 1936)
	aqueous leaf extract	(Pirtkien et al., 1960)
Hepatoprotective activity	aqueous leaf extract	(Hfaiedh et al., 2014)
Anti-inflammatory activity	aqueous leaf extract	(Seo et al., 2005)
	partitioned fraction	(Kashiwada et al., 2001)
	leaf extract	(Kim et al., 2000)

	methanolic extract	(Yasukawa et al., 1996)
Anti-oxidative activity	luteolin and luteolin 7- <i>O</i> -glucoside	(Hu and Kitts., 2004)
	partitioned fraction	(Kaurinovic et al., 2003).
	aqueous leaf extract	(Hagymasi et al., 2000)
Anti-carcinogenic activity	taraxinic acid	(Choi et al., 2002)
	aqueous extract	(Koo et al., 2004)
	aqueous extract	(Kim et al., 1998, 1999).
	ethanolic extract	(Ko et al., 2004)
Anti-allergic activity	desacetylmatricarin	(Ho et al., 1998)
Anti-hyperglycemic activity	ethanolic extract	(Hussain et al., 2004).
	ethanolic extract	(Petlevski et al., 2003).
	leaf extract	(Cho et al., 2002)
Anti-coagulatory/anti-thrombotic activity	ethanolic extract	(Yun et al., 2002).

1.3 민들레속 식물의 식물화학적 연구

1.3.1. Sesquiterpene

민들레에 대한 식물화학적 연구는 이미 많이 진행이 되어있다. 대표적인 화합물 계열로 국화과에서 많이 보고되는 sesquiterpene이 있다. *T. officinale*에서 eudesmanolide 골격의 tetrahydroidentin B (1), taraxacolide acid β -D-glucoside (2), guaianolide 골격의 11 β , 13-dihydrolactucin (3), ixerin D (4), germacranolide esters인 taraxinic acid β -D-glucopyranoside (5), 11, 13-dihydrotaraxinic acid β -glucoside (6), ainslioside (7) 가 분리되었으며 (Hansel et al., 1980, Kisiel and Barszcz, 2000), 그 외 *T. bicornis* Dahlst에서 sonchuside (8), *T. hondoensis* Nak. et Koidz에서 vernoflexuoside (9), *T. linearisquameum*

Soest에서 3β -hydroxy-4 α H-3-dihydrosantamarine- β -D-glucopyranoside (10)

T. platycarpum 에서 deacetylmatricarin (11), taraxafolide (12)와 그

유도체들이 보고되었다 (Michalska and Kisiel, 2001, Kisiel and Michalska,

2005, Zidorn et al., 1999, Michalska and Kisiel, 2005).

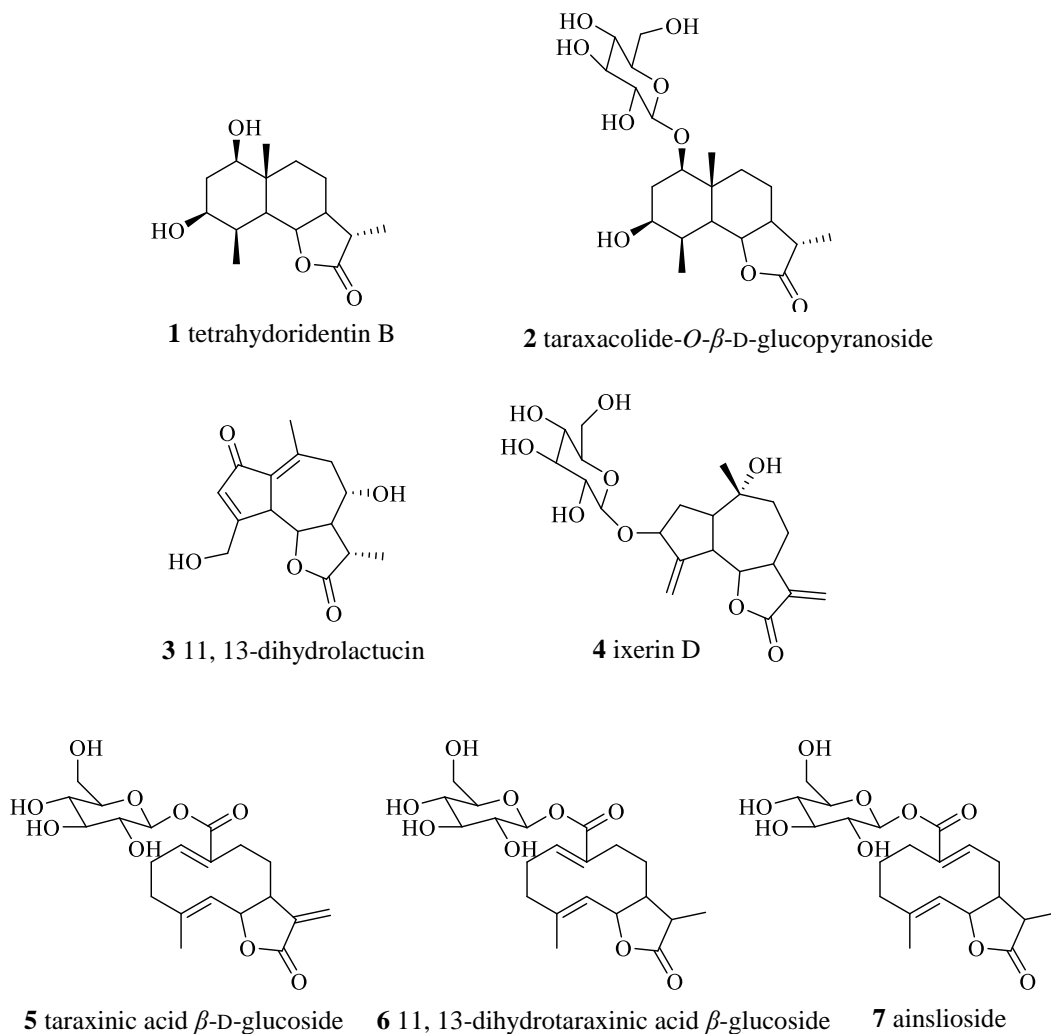


Fig. 1-1. Structure of sesquiterpenes reported in the genus *Taraxacum*.

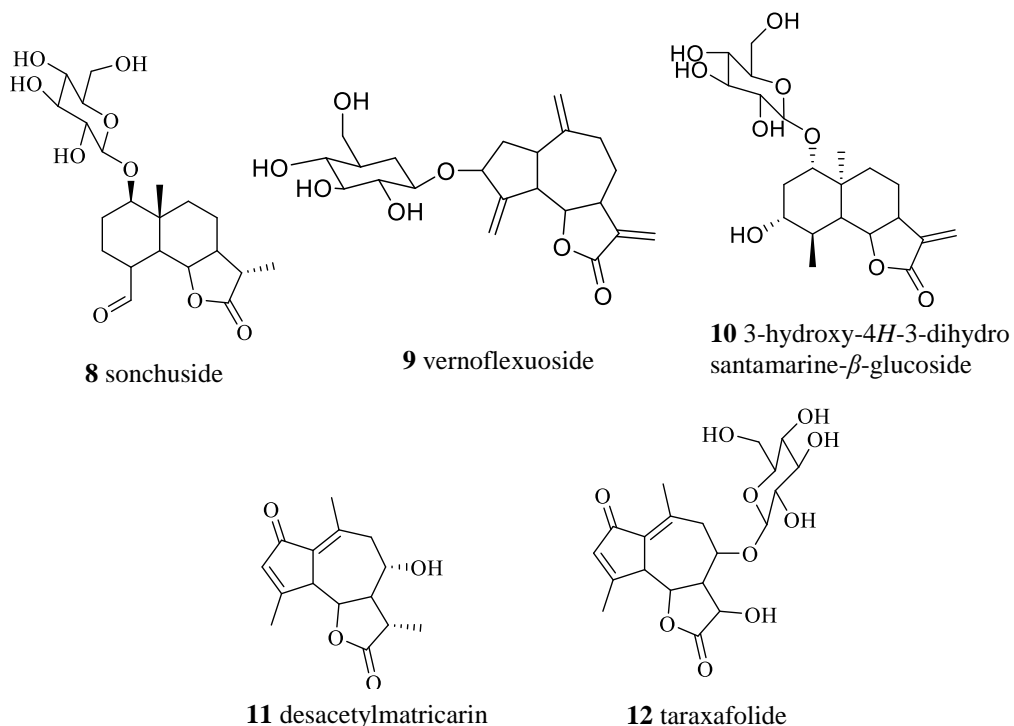


Fig. 1-1. Structure of sesquiterpenes reported in the genus *Taraxacum*.

1.3.2. Triterpene

Triterpene으로는 phytosterol구조가 많이 보고되어 있으며, phytosterol은 섭취 시 염증과 콜레스테롤수치를 낮추는 효과가 있어 비만이나 당뇨 활성의 관련성이 보고되어 있다. *T. officinale*에서 taraxasterol (**13**), arnidiol (**14**), Ψ -taraxasterol (**15**), faradiol (**16**), α - and β -amyrin (**17**, **18**), β -sitosterol (**19**), stigmasterol (**20**) 등의 phytosterol이 보고되어 있다 (Hansel et al., 1980, Akashi et al., 2000).

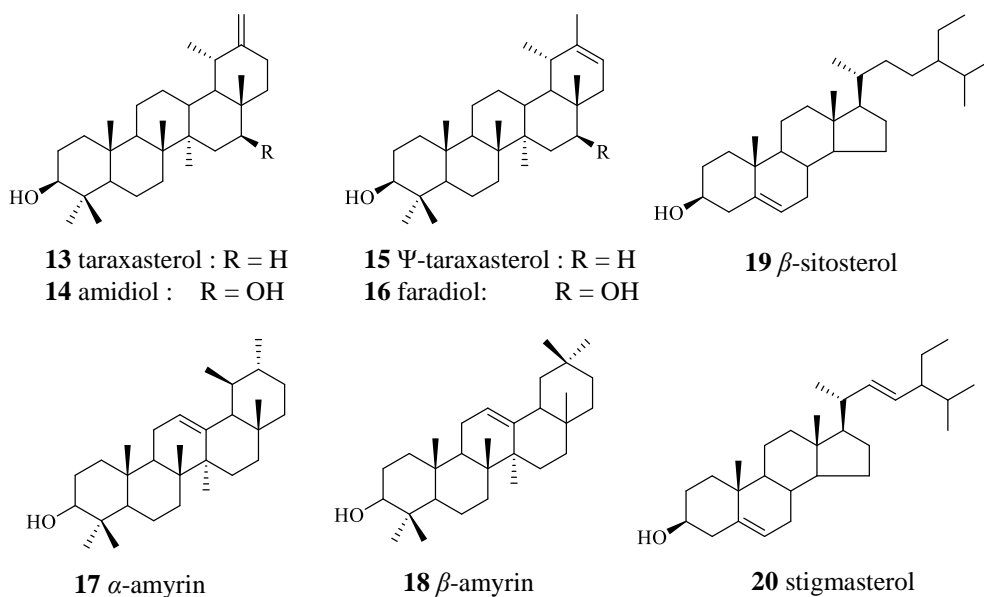


Fig. 1-2. Structure of triterpenes reported in the genus *Taraxacum*.

1.3.3. 페놀성 화합물

민들레에는 플라보노이드, 페놀산 유도체를 포함한 다양한 페놀성 화합물에 대한 보고가 많다. 앞서 서술한 민들레의 활성은 대부분 페놀성 화합물에서 비롯된 항산화, 항염증 활성이라 판단을 할 수 있다 (Wirngo et al., 2016). 분리 보고된 페놀성 화합물로는 chicoric acid (**21**), *p*-coumaric acid (**22**), caffeic acid (**23**), quinic acid (**24**), 4-hydroxyphenylacetic acid (**25**), syringic acid (**26**) 과 coumarin 화합물로 umbelliferone (**27**), esculetin (**28**), scopoletin (**29**), aesculin (**30**), cichoriin (**31**) 등이 있다 (Wolbis et al., 1993, Williams et al., 1996, Kuwajima et al., 1992). Flavonoid 는 luteolin glucoside (**32-35**), quercetin glucoside (**36-40**), apigenin glucoside (**41-43**)등이 보고되어 있다 (Wolbis et al., 1993, Williams et al., 1996).

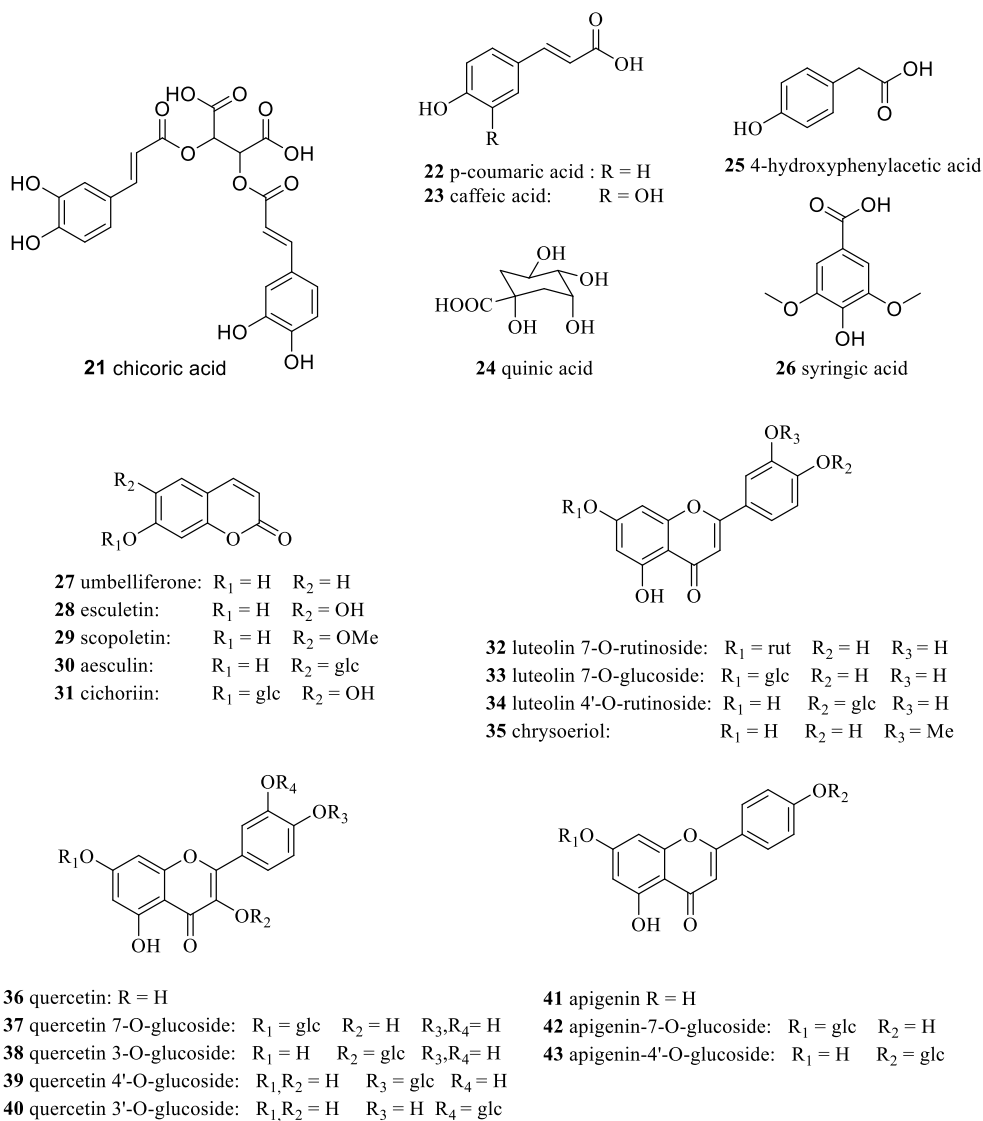


Fig. 2-1. Structure of phenolic derivatives reported in the genus *Taraxacum*.

1.3.4. Inositol

Inositol 화합물은 cyclohexane 구조이며, 한 탄소에 한 개씩의 hydroxyl 기가 치환된 2 차 대사산물이다. 주로 페놀성 functional group 이 hydroxyl 기에 치환되어 있는 형태를 띄며, inositol 은 9 개의 입체이성질체구조가 존재한다 (*myo*-, *epi*-, *scyllo*-, *neo*-, *D/L-chiro*-, *allo*-, *cis*-, *muco*-inositol) (Fig. 3.). 보고된 inositol 로는 1,2,5-tri-*O*-4-hydroxyphenyl acetyl-*chiro*-inositol (**44**), 4,5,6-tri-*O*-4-hydroxyphenylacetyl-*chiro*-inositol (**45**), 1,4-di-*O*-4-hydroxyphenylacetyl-*neo*-inositol (**46**)이 있다 (Kenny et al., 2014, Liu et al., 2014). 하지만 inositol 이성질체의 대한 동정이 명확히 되지 않은 상태이기 때문에 본 연구는 시작 전에 모든 inositol 이성질체에 대해 ^1H NMR 데이터를 정리, 동정하였다 (Table 3).

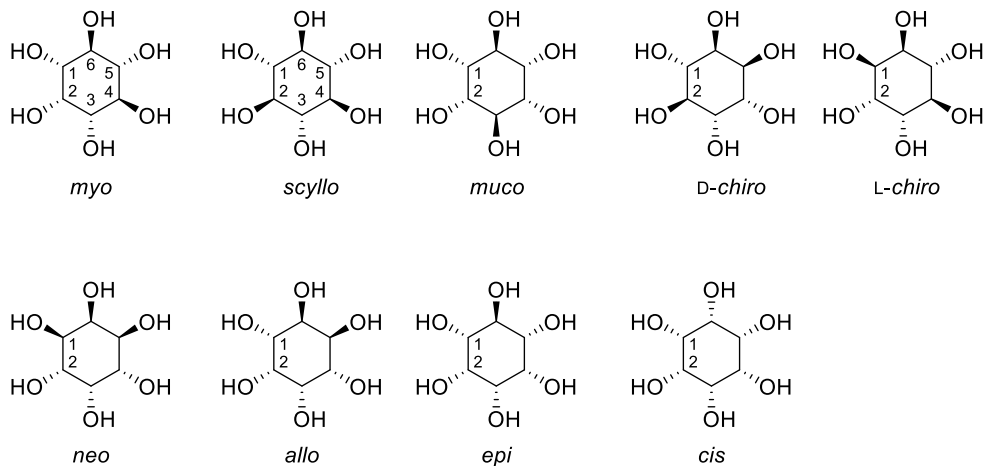


Fig. 3. Structure of basic inositols

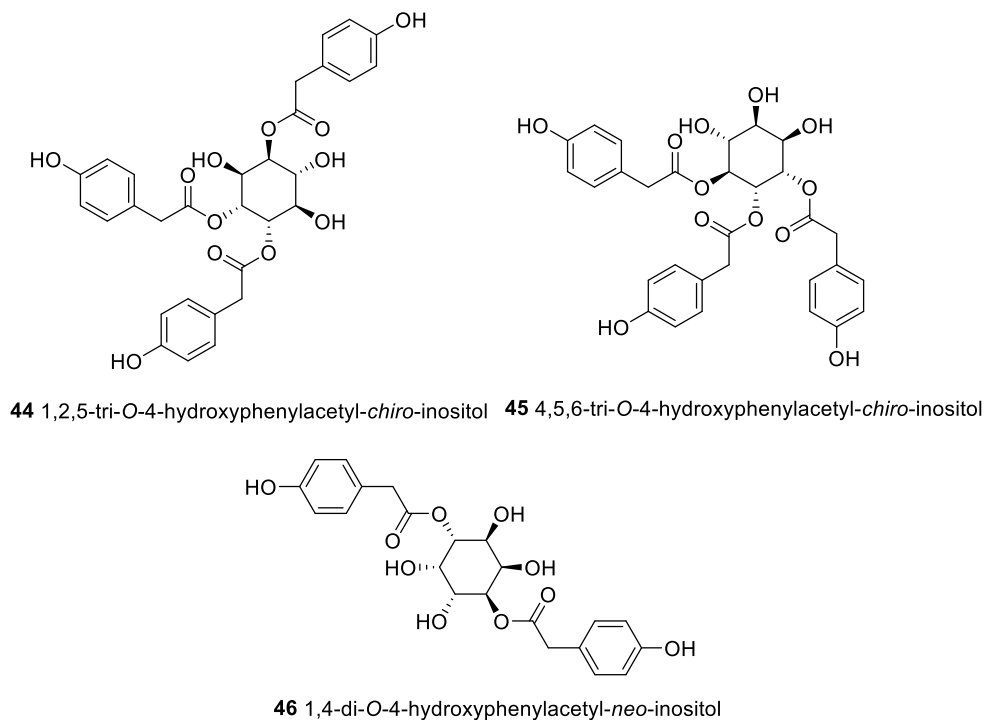


Fig. 2-2. Structure of inositol derivatives reported in the genus *Taraxacum*.

Table 3. ^1H NMR data of inositols

Inositol	^1H NMR	reference	
<i>myo</i> -	D_2O	D_2O	
1,3	3.54 (dd, 10.0, 2.9)	3.55 (dd, 10.0, 2.8)	
2	4.07 (t, 2.9)	4.07 (t, 2.9)	(Vukovic et al., 2015)
4,6	3.63 (t, 9.7)	3.63 (t, 9.8)	(Liu et al., 2014)
5	3.28 (t, 9.4)	3.29 (t, 9.4)	
<i>scyllo</i> -	D_2O	D_2O	
1,2,3,4,5,6	3.35 (s)	3.30 (s)	(Podeschwa et al., 2003)
<i>muco</i> -		D_2O	
1,2,4,5		3.75 (d, 5.9)	(Takahashi et al., 2000)
3,6		3.88 (t, 5.9)	

<i>chiro-</i>		D ₂ O	D ₂ O	
	1,2	4.03 (d, 2.3)	3.97 (br)	(Podeschwa et al., 2003)
	3,6	3.75 (dt, 6.8, 2.5)	3.70 (m)	(Takahashi et al., 2000)
	4,5	3.59 (dd, 7.1, 2.7)	3.53 (m)	
<i>neo-</i>			D ₂ O	
	1,2,4,5		3.64 (br)	(Podeschwa et al., 2003)
	3,6		3.92 (br)	(Takahashi et al., 2000)
<i>allo-</i>		D ₂ O	D ₂ O	
	2,5	3.90 (s)	3.85 (s)	(Podeschwa et al., 2003)
	1,3,4,6	4.04 (m)	3.98 (m)	
<i>epi-</i>		D ₂ O	D ₂ O	
	1,5	3.50 (dd, 9.9, 2.8)	3.35 (d, 9.7)	(Podeschwa et al., 2003)
	2,4	4.08 (t, 2.8)	3.93 (t, 2.6)	(Takahashi et al., 2000)
	3	3.75 (t, 3.0)	3.71 (t, 2.9)	
	6	3.86 (t, 9.9)	3.60 (t, 9.9)	
<i>cis-</i>		D ₂ O	D ₂ O	
	2,5	4.09 (s)	3.73 (s)	(Podeschwa et al., 2003)
	1,3,4,6	3.68 (s)	3.50 (s)	

1.3.5. 기타 화합물

Acylated γ -butyrolactone glycoside 화합물인 taraxacoside (**47**)는 *T. officinale*의 뿌리로부터 분리보고 된 바가 있다 (Rauwald and Huang, 1985). 하지만 butyrolactone 의 입체구조는 명확하게 동정되지 않은 상태이다. 그 외, alkaloid 구조인 taraxacine-A, B (**48**, **49**)는 *T. formosanum*로부터 분리보고 되었다 (Leu et al., 2003).

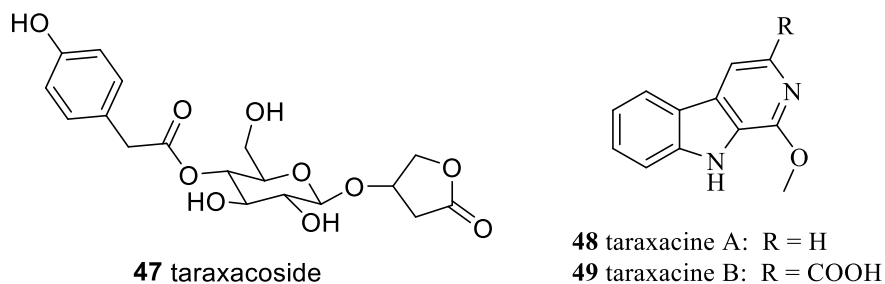


Fig. 2-3. Structure of miscellaneous compounds reported in the genus *Taraxacum*.

2. 연구의 목적

천연물을 이용한 당뇨병 치료제를 개발할 때, 下記의 네 가지 연구 방향이 있다 (Wirngo et al., 2016).

1. 당 재흡수 억제
2. 알파글루코시데이즈를 비롯한 당분해 효소 억제
3. 당 신생억제
4. 칼륨 channel 억제 (인슐린 분비촉진)

혈당강하제에 대한 설명에서 언급한 바와 같이 알파글루코시데이즈 억제제의 부작용은 다른 계열의 약물보다 상대적으로 적다. 따라서, 본 연구는 천연물에서 알파글루코시데이즈 억제활성을 갖는 small molecule 을 찾아 새로운 알파글루코시데이즈 억제제를 개발하기 위한 연구이다. 대표적으로 사용되는 알파글루코시데이즈 억제제 acarbose 는 다당류형태의 구조이며, 다당류와 같이 효소에 경쟁적 결합을 하여 억제활성을 나타낸다. Acarbose 의 부작용인 복통, 설사는 분해되지 않은

다당류가 대장에 유입되어 장내세균의 증식을 유발하기 때문에 발생한다 (Hanefeld, 1998, Satoh et al., 2015). 천연물에서 알파글루코시데이즈 억제 활성을 보이는 화합물들은 다당류형태가 아닌 저분자화합물 형태이기 때문에 acarbose 의 부작용이 개선된 알파글루코시데이즈 억제제의 개발이 가능하다.

Table 4. Chemical constituents from *Taraxacum officinale* related with antidiabetes action

	activity	reference
phytosterol	Antihyperglycemic and anti-inflammatory activity	(Petlevski et al., 2003)
sesquiterpene lactone	Anti-inflammatory, anti- hyperglycemic and antimicrobial activity	(Arpadjan et al., 2008)
flavonoid and flavonoid glycoside	Anti-oxidant activity	(Ceballos-Picot et al., 1996), (Hagymasi et al., 2000)
phenolic acid	Anti-oxidative and immunostimulatory activity	(Boden, 1997), (Kenny et al., 2015)

민들레가 당뇨병 치료에 사용되었다는 기록은 앞서 언급하였다. 이를 근거로 당뇨 활성연구가 보고 되어있다 (Table 4). 포공영에서 분리한 phytosterol, sesquiterpene 들은 혈당을 낮추고, 항염증 활성을 보이며 (Petlevski et al., 2003, Arpadjan et al., 2008), flavonoid 와 phenolic 화합물 역시

항산화 활성 (Hagymasi et al., 2000, Kenny et al., 2015) 으로 당뇨병치료와 관련이 있다고 한다. 하지만 이들은 모두 항산화, 항염 활성을 이용하여 β 세포를 자극하거나 당 신생을 억제하는 방향이지만, 알파글루코시데이즈를 표적하는 하는 연구는 보고되지 않은 상황이다. 따라서, 본 연구는 당뇨활성을 나타냈던 포공영에서 알파글루코시데이즈 효소를 억제하는 후보물질을 찾는 것이며, 이 결과는 새로운 알파글루코시데이즈 억제제 신약을 개발하는데 이바지할 수 있을 것이다.

II. 실험 재료 및 방법

1. 재료

Taraxacum officinale (서양민들레)

서양민들레 *Taraxacum officinale* F.H. Wigg 는 휴먼허브 (경산, 한국)에서 구매하였으며 서울대학교 약학대학 김진웅 교수로부터 감정 받은 후 실험에 사용하였다. 표본 (# CU201508T/O)은 가톨릭대학교에 보관되어 있다.

시약

모든 크로마토그래피에 사용한 유기용매는 분석용이며 대정화금 (경기도, 한국)에서 구매하였다. HPLC등급 acetonitrile 과 methanol 은 한국 JT baker (서울, 한국)에서 구매하였으며, 정제수는 Millipore Milli-Q® 정수시스템을 이용하였다. 크로마토그래피에 사용한 Silica gel 60과 RP-C18 silica gel은 Merck (Kenilworth, NJ, USA); Sephadex LH-20 은 Pharmacia Co. (Stockholm, Sweden); TLC plate에 코팅된 silica gel 및 silica gel RP-18은 Merck (Kenilworth, NJ, USA)에서 제조된 재료를 사용하였다.

장비

Optical rotations: P-2000 digital polarimeter (Jasco, Tokyo, Japan).

NMR: AscendTM 500, 800 spectrometer (Bruker, Germany).

UV spectrometer: UV-1800 spectrometer (Shimadzu, Japan).

HPLC: Agilent 1260 infinity HPLC system (Agilent Technologies, Santa Clara, CA, USA)

Gilson HPLC 805 module equip with 306 pump and 151 UV/Vis detector (Gilson, USA)

MPLC: IOTA S 300 pump (ECOM, UK) equipped with 600 UV–VIS variable wavelength detector (Sapphire technology, Hong Kong)

CombiFlash Rf system (Teledyne Isco, USA)

HPLC 컬럼: Inno C18 column (5 μm , 20.0 mm \times 250 mm, Young Jin Biochrom Co. Ltd., Korea)

HR-ESI-MS: Agilent 6530 ESI-Q-TOF mass spectrometer (Agilent Technologies, Santa Clara, CA, USA)

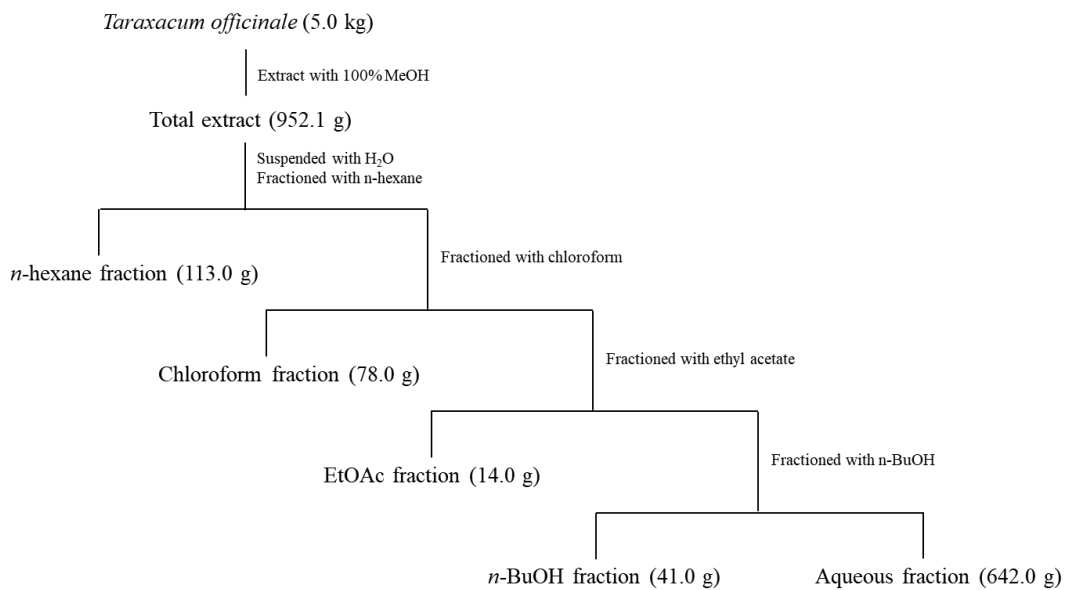
Ultrasonicator: Branson 5210 (UK)

Evaporator: EYELANE (Japan)

2. 방법

2.1 추출 및 분획

서양민들레 전체부위 (5.0 kg)을 100% 메탄올로 초음파추출 3 회 (12 L)하여 951.0 g 의 추출물을 추출하였다. 이를 물에 현탁하여 *n*-hexane, chloroform, ethyl acetate 및 *n*-butanol 순으로 분획을 실시하였고 각각 113.0, 78.0, 14.0, 41.0 g 의 분획물을 확보하였다.

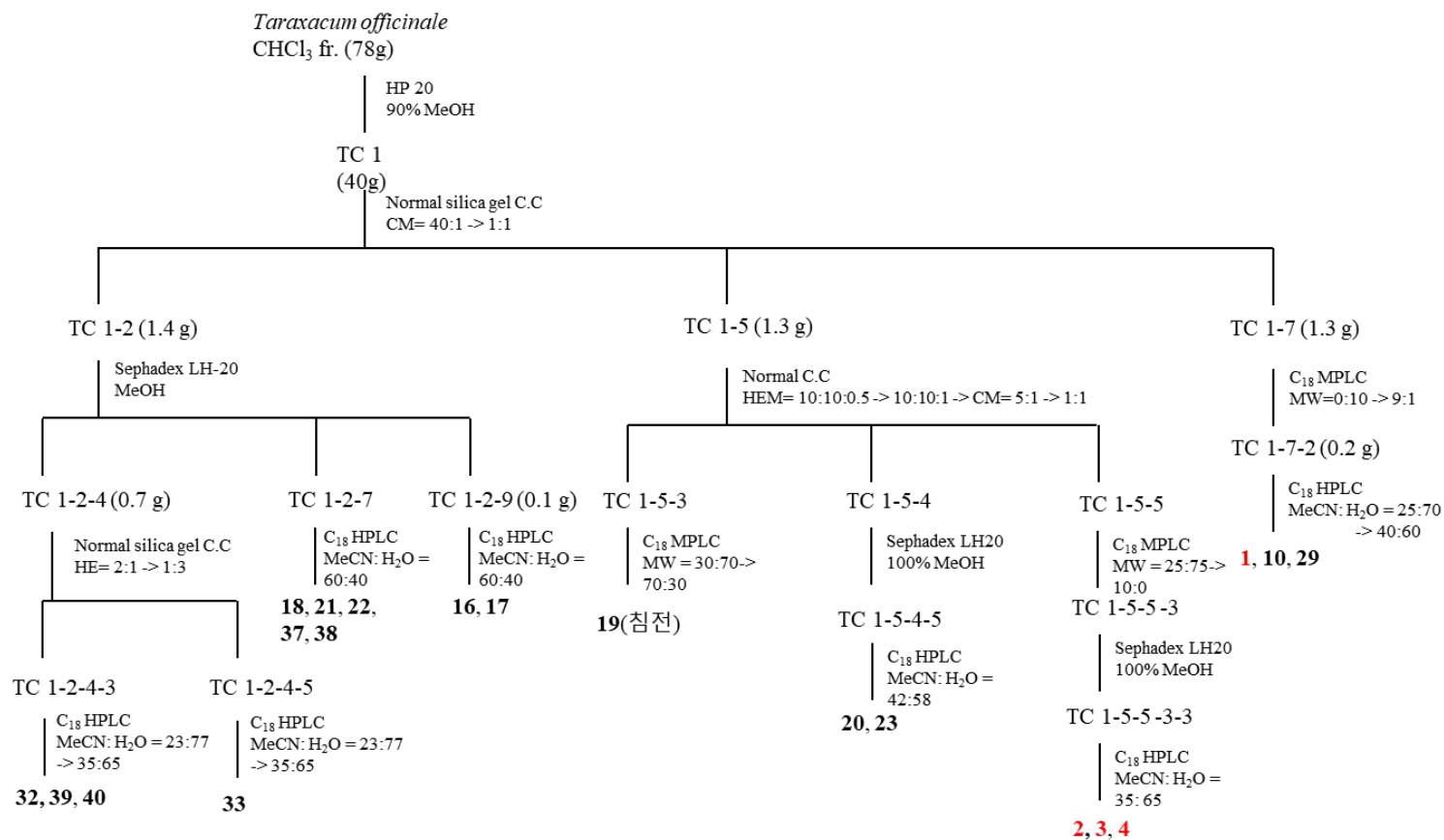


Scheme1. Extraction and fractionation of *T. officinale*

2.2 분리 및 정제

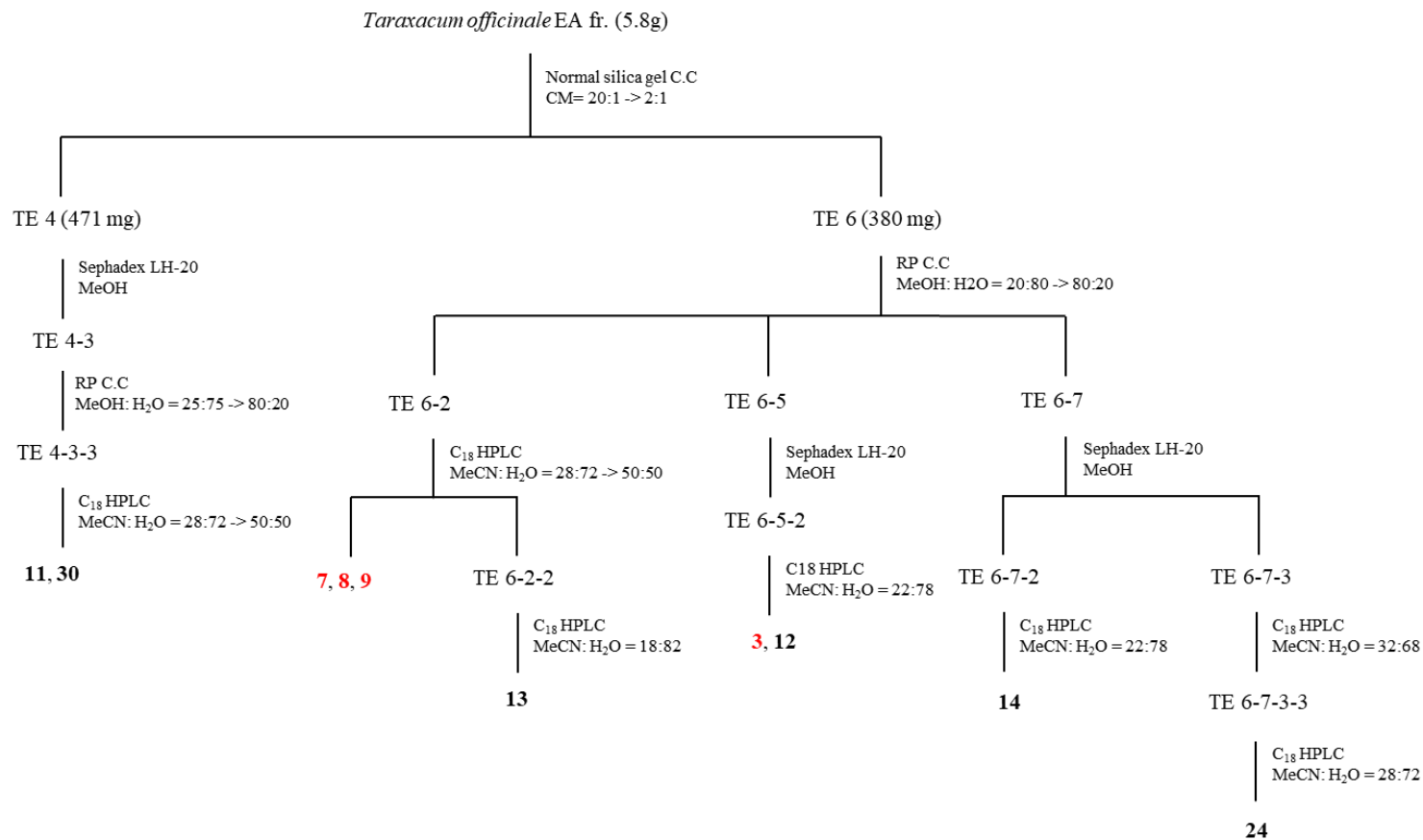
CHCl_3 분획물을 HP-20 (90% MeOH) 컬럼크로마토그래피를 실시하여 2개의 소분획으로 나누었다 (TC1, 2). TC1 소분획에 대해 컬럼크로마토그래피 [CHCl_3 -MeOH (40:1 \rightarrow 1:1)]를 실시하였고, 아홉 개의 소분획으로 분리하였다 (TC1-1~1-9). TC 1-2 소분획을 sephadex LH-20 (100% MeOH)를 통하여 아홉 개의 소분획으로 나누었고 (TC 1-2-1~1-2-9), 이 중 TC 1-2-4를 silica gel 컬럼 크로마토그래피 [hexane-EtOAc (2:1 \rightarrow 1:3)]를 통해 네 개의 소분획으로 나누었다 (TC 1-2-4-1~1-2-4-5). 소분획 TC 1-2-2-3과 TC 1-2-2-5는 HPLC (23–35% aqueous MeCN) 정제를 통해 화합물 **32** (10.0 mg), **33** (2.5 mg), **39** (1.7 mg), **40** (2.0 mg) 분리하였다. 또한 TC 1-2-7에서 HPLC (60% aqueous MeCN) 정제를 통해 화합물 **18** (5.3 mg), **21** (15.0 mg), **22** (3.0 mg), **37** (4.9 mg), **38** (7.3 mg)을 분리정제 하였다. 화합물 **16** (7.0 mg)과 **17** (2.0 mg)은 TC 1-2-4에서 HPLC (60% aqueous MeCN)를 통해 분리하였다. 소분획 TC 1-5을 silica gel 컬럼 크로마토그래피 [hexane-EtOAc-MeOH (10:10:0.5 \rightarrow 10:10:1) \rightarrow CHCl_3 -MeOH solvent system (5:1 \rightarrow 1:1)]를 통해 다섯 개의 소분획으로 나누었다 (TC 1-5-1 ~ 1-5-5). 이 중 TC 1-5-3에서 재결정을 통해 화합물 **19**를 분리하였고, TC 1-5-4을 Sephadex LH-20 (100% MeOH)을 통해 다섯 개의 소분획으로 나누었고, 이 중 TC 1-5-4-5에서 HPLC (42% aqueous MeCN) 정제를 통해 화합물 **20** (11.0 mg)과 **23** (4.0 mg)를 분리하였다. TC 1-5-5에

대해 RP-silica gel과 sephadex LH-20 컬럼크로마토그래피를 실시하였고, 다시 HPLC (35% aqueous MeCN)를 실시하여 화합물 **2** (8.0 mg), **3** (2.0 mg), **4** (2.3 mg)를 분리정제 하였다. 소분획 TC 1-7에 대해 RP-silica gel 컬럼 크로마토그래피 (0-10% aqueous MeOH)을 실시하였고 네 개의 소분획으로 나누었다 (TC 1-7-1 ~ 1-7-4). 화합물 **1** (7.0 mg), **10** (2.0 mg), **29** (2.0 mg)는 소분획 TC 1-7-2를 정제하여 (HPLC, 25% → 40% aqueous MeCN) 분리하였다.



Scheme2. Isolation of compounds from the CHCl₃ soluble extract of *T. officinale*

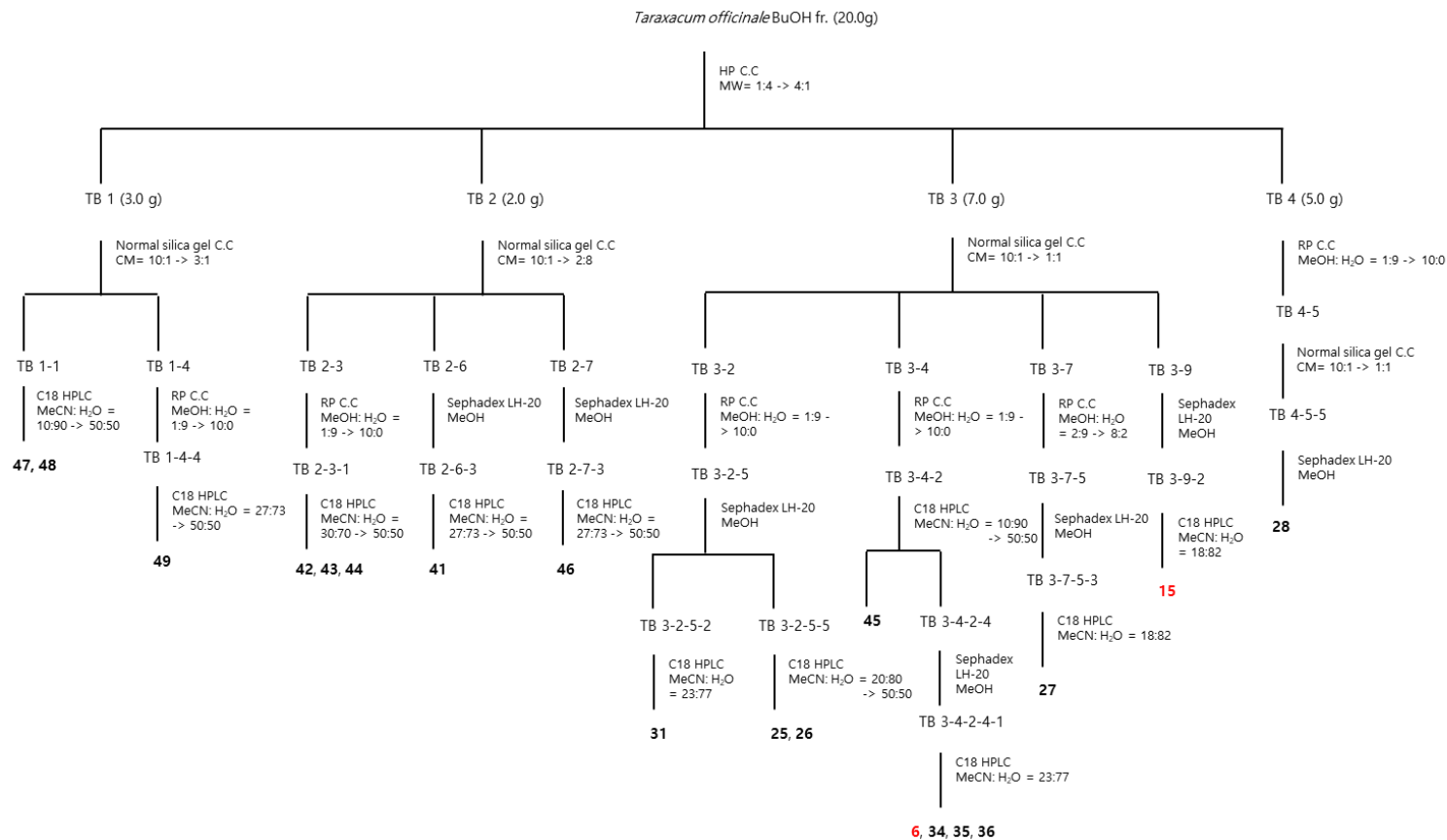
Ethyl acetate 분획물을 silica gel 컬럼크로마토그래피 [CHCl_3 -MeOH (20:1→2:1)]를 통해 일곱 개의 소분획으로 나누었다 (TE 1 ~ 7). 소분획 TE 4를 sephadex LH-20 (100% MeOH)를 통해 여섯 개의 소분획으로 나누었고, 그 중 TE 4-3을 RP 크로마토그래피를 통하여 일곱 개의 소분획으로 나누었으며, TE 4-3-3을 HPLC (28% → 50% MeCN)를 통하여 화합물 **11** (2.0 mg)과 **30** (5.0 mg)을 분리하였다. 소분획 TE 6을 RP 크로마토그래피 (20% → 80% MeOH)를 통해 아홉 개의 소분획으로 나누었다 (TE 6-1 ~ 6-9). TE 6-2를 semiprep C_{18} HPLC (28% → 50% MeCN)을 통해 화합물 **7** (2.0 mg), **8** (10.0 mg), **9** (1.5 mg)와 소분획 TE 6-2-2를 정제하였다. 그리고 TE 6-2-2를 정제하여 (HPLC, 18% MeCN) 화합물 **13** (17.0 mg)을 분리하였다. 소분획 TE 6-5에 대하여 sephadex LH-20 (100% MeOH)과 HPLC (22% MeCN)를 실시하여 화합물 **3** (1.0 mg), **12** (10.0 mg)를 정제하였다. 소분획 TE 6-7에 sephadex LH-20을 실시하여 소분획 네 개로 나누었고 (TE 6-7-1 ~ 6-7-4), TE 6-7-2에 HPLC (22% MeCN)를 실시하여 화합물 **14** (2.0 mg)를 정제하였다. 화합물 **24** (7.0 mg)는 TE 6-7-3에서 반복 HPLC (32 % MeCN, 28% MeCN)를 실시하여 분리 정제하였다.



Scheme3. Isolation of compounds from the EA soluble extract of *T. officinale*

Butanol 분획을 HP-20 컬럼크로마토그래피 [MeOH-H₂O (1:4 → 4:1)]를 통해 다섯 개의 소분획으로 나누었다 (TB 1 ~ 5). 소분획 TB 1 에 대해 silica gel 컬럼크로마토그래피 [CHCl₃-MeOH (10:1→3:1)]를 실시하였고 다섯 개의 소분획으로 나누었다 (TB 1-1 ~ 1-5). 화합물 **47** (1.1 mg)과 **48** (2.0 mg)은 TB 1-1 을 HPLC (10 → 50% MeCN) 정제하여 분리하였다. 소분획 TB 1-4 에 대해 반복적 크로마토그래피 [RP, MeOH-H₂O (1:9 → 10:0) & HPLC, MeCN-H₂O (27:73 → 50:50)]를 실시하여 화합물 **49** (6.0 mg)를 분리하였다. 소분획 TB 2 에 silica gel 컬럼크로마토그래피 [CHCl₃-MeOH (10:1→2:8)]를 실시하여 여덟 개의 소분획으로 나누었다 (TB 2-1 ~ 2-8). 화합물 **42** (3.5 mg), **43** (12.0 mg), **44** (8.0 mg)는 TB 2-3 에 여러 크로마토그래피 [RP, MeOH-H₂O (1:9 → 10:0) & HPLC, MeCN-H₂O (30:70 → 50:50)]를 실시하여 분리하였다. 화합물 **41** (6.0 mg)과 **46** (4.0 mg)은 각각 TB 2-6 과 TB 2-7 분획에서 여러크로마토그래피 [sephadex LH-20, 100% MeOH & HPLC, MeCN-H₂O (27:73 → 50:50)]로 정제분리 하였다. 소분획 TB 3 에 대해 silica gel 크로마토그래피를 실시하여 아홉 개의 분획으로 나누었다 (TB 3-1 ~ 3-9). TB 3-2 를 RP 크로마토그래피 [MeOH-H₂O (1:9 → 10:0)]를 통해 다섯 개의 분획으로 나누었고, 그 중 TB 3-2-5 를 sephadex LH-20 (100% MeOH)를 5 개의 분획으로 또 나누었다 (TB 3-2-5-1 ~ 3-2-5-5). 화합물 **31** (10.0 mg)을 TB 3-2-5-2 에서 HPLC (23% aqueous MeCN)를 통해 정제하였고, TB 3-2-5-5 에서 화합물 **25** (7.0 mg), **26** (2.0 mg)을 분리하였다 [HPLC, MeCN-H₂O (20:80 → 50:50)]. 소분획 TB 3-4 에 RP

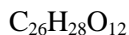
컬럼크로마토그래피를 실시하여 다섯 개의 분획으로 나누었고 (TB 3-4-1 ~ 3-4-5), TB 3-4-2 에서 HPLC [MeCN-H₂O (10:90 → 50:50)]를 통하여 화합물 **45** (4.0 mg) 와 소분획 네 개를 분리하였다 (TB 3-4-2-2 ~ TB 3-4-2-5). 화합물 **6** (21.0 mg), **34** (7.0 mg), **35** (7.0 mg), **36** (5.5 mg)은 TB 3-4-2-4 를 HPLC (23% aqueous MeCN) 정제를 통하여 분리하였다. 화합물 **27** (3.0 mg)은 TB 3-7 에 여러 크로마토그래피 [RP, MeOH-H₂O (2:9 → 8:2) & sephadex LH-20, 100% MeOH & HPLC, MeCN-H₂O (27:73 → 50:50)]을 적용하여 정제하였다. 화합물 **15** (3.0 mg) 는 TB 3-9 를 여러 정제법 [sephadex LH-20, 100% MeOH, HPLC, MeCN-H₂O (27:73 → 50:50)]을 통하여 분리하였다. 소분획 TB 4 에 RP 컬럼크로마토그래피를 적용하여 여섯 개의 소분획으로 나누었고, 그 중 TB 4-5 에 대해 반복적 크로마토그래피 [silica gel column, CHCl₃-MeOH (10:1→3:1) & sephadex LH-20, 100% MeOH]를 사용하여 화합물 **28** (1.2 mg) 을 분리하였다.



Scheme4. Isolation of compounds from the BuOH soluble extract of *T. officinale*

화합물 1

Colorless gum



$[\alpha]_{\text{D}}^{20} +52.4$ (c 0.7, MeOH)

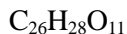
UV (MeOH) λ_{max} 218 (4.06), 278 (3.32) nm

HRESIMS m/z 555.1465 $[\text{M}+\text{Na}]^+$ (calcd. for $\text{C}_{26}\text{H}_{28}\text{O}_{12}\text{Na}$, 555.1478)

^1H NMR (DMSO- d_6 , 500 MHz) ^{13}C NMR (DMSO- d_6 , 125 MHz): see table 5 and 6.

화합물 2

Colorless gum



$[\alpha]_{\text{D}}^{20} +49.8$ (c 0.23, MeOH)

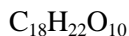
UV (MeOH) λ_{max} 219 (3.98), 268 (3.53) nm

HRESIMS m/z 561.1602 $[\text{M}+\text{HCOO}]^-$ (calcd. for $\text{C}_{26}\text{H}_{27}\text{O}_{11}$, 561.1608)

^1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 5 and 6.

화합물 3

Colorless gum



$[\alpha]_{\text{D}}^{20} +25.3$ (c 1.0, MeOH)

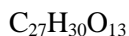
UV (MeOH) λ_{max} 222 (3.86), 274 (3.13)

HRESIMS m/z 421.1125 $[\text{M}+\text{Na}]^+$ (calcd. for $\text{C}_{18}\text{H}_{22}\text{O}_{10}\text{Na}$, 421.1111)

^1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 5 and 6.

화합물 4

Colorless gum



$[\alpha]_{\text{D}}^{20} +26.2$ (c 0.2, MeOH)

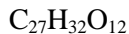
UV (MeOH) λ_{max} 219 (4.05), 267 (3.50) nm

HRESIMS m/z 561.1598 $[\text{M}-\text{H}]^-$ (calcd. for $\text{C}_{27}\text{H}_{29}\text{O}_{13}$, 561.1608)

^1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 5 and 6.

화합물 5

Colorless gum



$[\alpha]_{\text{D}}^{20} +33.8$ (c 0.8, MeOH)

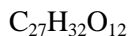
UV (MeOH) λ_{max} 218 (3.99), 265 (3.32) nm

HRESIMS m/z 593.1863 $[\text{M}+\text{HCOO}]^-$ (calcd. for $\text{C}_{28}\text{H}_{33}\text{O}_{14}$, 593.1870)

^1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 5 and 6.

화합물 6

Colorless gum



$[\alpha]_{\text{D}}^{20} +32.0$ (c 0.5, MeOH)

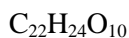
UV (MeOH) λ_{max} 221 (4.06), 275 (3.21) nm

HRESIMS m/z 453.1392 $[\text{M}+\text{Na}]^+$ (calcd. for $\text{C}_{27}\text{H}_{32}\text{O}_{12}\text{Na}$, 453.1373)

^1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 5 and 6.

화합물 7

Colorless gum



$[\alpha]_{\text{D}}^{20} +23.3$ (c 0.6, MeOH)

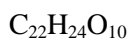
UV (MeOH) λ_{max} 224 (4.05), 274 (3.29) nm

HRESIMS m/z 471.1281 $[\text{M}+\text{Na}]^+$ (calcd. for $\text{C}_{22}\text{H}_{24}\text{O}_{10}\text{Na}$, 471.1267)

^1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 7 and 8.

화합물 8

Colorless gum



$[\alpha]_{\text{D}}^{20} +24.2$ (c 0.5, MeOH)

UV (MeOH) λ_{\max} 221 (4.02), 273 (3.18) nm

HRESIMS m/z 471.1281 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{22}H_{24}O_{10}Na$, 471.1267)

1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 7 and 8.

화합물 9

Colorless gum

$C_{30}H_{30}O_{12}$

$[\alpha]_D^{20} +38.7$ (c 0.4, MeOH)

UV (MeOH) λ_{\max} 222 (3.80), 274 (3.02) nm

HRESIMS m/z 605.1664 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{30}H_{30}O_{12}Na$, 605.1635)

1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 7 and 8.

화합물 10

Colorless gum

$C_{30}H_{30}O_{12}$

$[\alpha]_D^{20} +26.7$ (c 0.5, MeOH)

UV (MeCN: H₂O): λ_{\max} 222 (3.99) , 275 (3.21) nm

HRESIMS m/z 581.1672 $[M-H]^-$ (calcd. for $C_{30}H_{29}O_{12}$, 581.1659)

1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 7 and 8.

화합물 11

Colorless gum

$C_{30}H_{30}O_{12}$

$[\alpha]_D^{20} +24.4$ (c 0.6, MeOH)

UV (MeOH) λ_{\max} 224 (3.91), 277 (3.11) nm

HRESIMS m/z 605.1658 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{30}H_{30}O_{12}Na$, 605.1635)

1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 7 and 8.

화합물 12

Colorless gum

$C_{22}H_{24}O_{10}$

$[\alpha]_D^{20}$ -30.9 (*c* 0.6, MeOH)

UV (MeOH) λ_{max} 222 (3.88), 277 (3.10) nm

HRESIMS m/z 471.1285 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{22}H_{24}O_{10}Na$, 471.1267)

1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 7 and 8.

화합물 13

Colorless gum

$C_{22}H_{24}O_{10}$

$[\alpha]_D^{20}$ -29.6 (*c* 2.0, MeOH)

UV (MeOH) λ_{max} 222 (3.94), 275 (3.17) nm

HRESIMS m/z 471.1288 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{22}H_{24}O_{10}Na$, 471.1267)

1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 7 and 8.

화합물 14

Colorless gum

$C_{22}H_{24}O_{10}$

$[\alpha]_D^{20}$ +38.8 (*c* 0.6, MeOH)

UV (MeOH) λ_{max} 222 (3.99), 276 (3.16) nm

HRESIMS m/z 471.1288 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{22}H_{24}O_{10}Na$, 471.1267)

1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 7 and 8

화합물 15

Yellow amorphous powder

$C_{27}H_{33}NO_{12}$

$[\alpha]_D^{20}$ +57.6 (*c* 0.3, MeOH)

UV (MeOH) λ_{max} 221 (3.92), 279 (3.11) nm

HRESIMS m/z 564.2091 $[M+H]^+$ (calcd. for $C_{27}H_{34}NO_{12}$, 564.2081)

1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 11 and 12.

화합물 16

Yellow amorphous powder



$[\alpha]_{\text{D}}^{20}$ -44.2 (*c* 1.0, MeOH)

UV (MeOH) λ_{max} 286 (3.95), 328 (4.01) nm

HRESIMS m/z 299.0567 $[\text{M}-\text{H}]^-$ (calcd. for $\text{C}_{16}\text{H}_{11}\text{O}_6$, 299.0556)

^1H NMR (DMSO- d_6 , 500 MHz) ^{13}C NMR (DMSO- d_6 , 125 MHz): see table 9 and 10.

화합물 17

Yellow amorphous powder



$[\alpha]_{\text{D}}^{20}$ -34.4 (*c* 1.0, MeOH)

UV (MeOH) λ_{max} 271 (4.05), 329 (4.12) nm

HRESIMS m/z 329.0677 $[\text{M}-\text{H}]^-$ (calcd. for $\text{C}_{17}\text{H}_{13}\text{O}_7$, 329.0661)

^1H NMR (DMSO- d_6 , 500 MHz) ^{13}C NMR (DMSO- d_6 , 125 MHz): see table 9 and 10.

화합물 18

Yellow amorphous powder



$[\alpha]_{\text{D}}^{20}$ -54.4 (*c* 1.0, MeOH)

UV (MeOH) λ_{max} 270 (3.85), 350 (4.06) nm

HRESIMS m/z 353.0635 $[\text{M}+\text{Na}]^+$ (calcd. for $\text{C}_{17}\text{H}_{14}\text{O}_7\text{Na}$, 353.0637)

^1H NMR (DMSO- d_6 , 500 MHz) ^{13}C NMR (DMSO- d_6 , 125 MHz): see table 9 and 10.

화합물 19

Yellow amorphous powder

$C_{15}H_{10}O_6$

$[\alpha]_D^{20}$ -38.1 (*c* 1.0, MeOH)

UV (MeOH) λ_{\max} 268 (3.83), 344 (4.01) nm

HRESIMS m/z 285.0411 $[M-H]^-$ (calcd. for $C_{15}H_9O_6$, 285.0399)

1H NMR (DMSO- d_6 , 500 MHz) ^{13}C NMR (DMSO- d_6 , 125 MHz): see table 9 and 10.

화합물 20

Yellow amorphous powder

$C_{26}H_{24}O_{10}$

$[\alpha]_D^{20}$ -58.2 (*c* 0.5, MeOH)

UV (MeOH) λ_{\max} 271 (4.03), 333 (4.12) nm

HRESIMS m/z 497.1465 $[M-H]^-$ (calcd. for $C_{26}H_{23}O_{10}$, 497.1448)

1H NMR (DMSO- d_6 , 500 MHz) ^{13}C NMR (DMSO- d_6 , 125 MHz): see table 11 and 12.

화합물 21

Yellow amorphous powder

$C_{28}H_{28}O_{11}$

$[\alpha]_D^{20}$ -17.8 (*c* 1.0, MeOH)

UV (MeOH) λ_{\max} 272 (3.92), 340 (4.07) nm

HRESIMS m/z 563.1520 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{28}H_{28}O_{11}Na$, 563.1529)

1H NMR (DMSO- d_6 , 500 MHz) ^{13}C NMR (DMSO- d_6 , 125 MHz): see table 11 and 12

화합물 22

Yellow amorphous powder

$C_{28}H_{28}O_{11}$

$[\alpha]_D^{20}$ -11.8 (*c* 1.0, MeOH)

UV (MeOH) λ_{\max} 272 (3.97), 338 (4.02) nm

HRESIMS m/z 563.1519 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{28}H_{28}O_{11}Na$, 563.1529)

^1H NMR (DMSO- d_6 , 500 MHz) ^{13}C NMR (DMSO- d_6 , 125 MHz): see table 11 and 12

화합물 23

Yellow amorphous powder

$\text{C}_{26}\text{H}_{24}\text{O}_{10}$

$[\alpha]_{\text{D}}^{20} +26.4$ (c 0.5, MeOH)

UV (MeOH) λ_{max} 271 (4.05), 329 (4.13) nm

HRESIMS m/z 497.1465 $[\text{M}-\text{H}]^-$ (calcd. for $\text{C}_{26}\text{H}_{23}\text{O}_{10}$, 497.1448)

^1H NMR (DMSO- d_6 , 500 MHz) ^{13}C NMR (DMSO- d_6 , 125 MHz): see table 11 and 12.

화합물 24

Yellow amorphous powder

$\text{C}_{21}\text{H}_{24}\text{O}_{10}$

$[\alpha]_{\text{D}}^{20} +34.4$ (c 0.5, MeOH)

UV (MeOH) λ_{max} 222 (3.92), 276 (3.11) nm

HRESIMS m/z 459.1281 $[\text{M}+\text{Na}]^+$ (calcd. for $\text{C}_{21}\text{H}_{24}\text{O}_{10}\text{Na}$, 459.1267)

^1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 11 and 12.

화합물 25

Yellow amorphous powder

$\text{C}_{27}\text{H}_{30}\text{O}_{15}$

$[\alpha]_{\text{D}}^{20} -33.1$ (c 0.01, MeOH)

UV (MeOH) λ_{max} 254 (4.36), 346 (3.91) nm

HRESIMS m/z 595.1682 $[\text{M}+\text{Na}]^+$ (calcd. for $\text{C}_{27}\text{H}_{30}\text{O}_{15}\text{Na}$, 595.1663)

^1H NMR (DMSO- d_6 , 500 MHz) ^{13}C NMR (DMSO- d_6 , 125 MHz): see table 13 and 14.

화합물 26

Yellow amorphous powder

$C_{27}H_{30}O_{16}$

$[\alpha]_D^{20}$ -15.2 (*c* 0.01, MeOH)

UV (MeOH) λ_{\max} 254 (4.12), 355 (4.06) nm

HRESIMS m/z 611.1627 $[M+H]^+$ (calcd. for $C_{27}H_{31}O_{16}$, 611.1612)

1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 13 and 14.

화합물 27

Yellow amorphous powder

$C_{27}H_{30}O_{16}$

$[\alpha]_D^{20}$ -18.2 (*c* 0.01, MeOH)

UV (MeOH) λ_{\max} 254 (4.12), 355 (4.06) nm

HRESIMS m/z 611.1630 $[M+H]^+$ (calcd. for $C_{27}H_{31}O_{16}$, 611.1612)

1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 13 and 14.

화합물 28

Yellow amorphous powder

$C_{27}H_{30}O_{16}$

$[\alpha]_D^{20}$ -12.2 (*c* 0.01, MeOH)

UV (MeOH) λ_{\max} 254 (4.12), 355 (4.06) nm

HRESIMS m/z 449.1087 $[M + H]^+$ (calcd. $C_{21}H_{21}O_{11}$, 449.1084)

1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 13 and 14.

화합물 29

Brown amorphous powder

$C_{21}H_{30}O_9$

$[\alpha]_D^{20}$ -25.8 (*c* 0.5, MeOH)

UV (MeOH) λ_{\max} 243 (4.16), 260 (3.86) nm

HRESIMS m/z 449.1767 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{21}H_{30}O_9Na$, 449.1788)

1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 15 and 16.

화합물 30

Brown amorphous powder

$C_{21}H_{28}O_9$

$[\alpha]_D^{20}$ -31.2 (c 0.5, MeOH)

UV (MeOH) λ_{max} 243 (3.96), 260 (3.12) nm

HRESIMS m/z 447.1641 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{21}H_{28}O_9Na$, 447.1631)

1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 15 and 16.

화합물 31

Brown amorphous powder

$C_{21}H_{32}O_9$

$[\alpha]_D^{20}$ -13.2 (c 0.5, MeOH)

UV (MeOH) λ_{max} 214 (3.79) nm

HRESIMS m/z 451.1962 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{21}H_{32}O_9Na$, 451.1944)

1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 15 and 16.

화합물 32

Colorless gum

$C_{13}H_{20}O_3$

$[\alpha]_D^{20}$ -50.1 (c 0.5, MeOH)

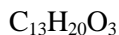
UV (MeOH) λ_{max} 243 (3.86) nm

HRESIMS m/z 225.1486 $[M-H]^+$ (calcd. for $C_{13}H_{21}O_3$ 225.1491)

1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 15 and 16.

화합물 33

Colorless gum



$[\alpha]_{\text{D}}^{20}$ -55.9 (*c* 0.1, MeOH)

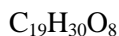
UV (MeOH) λ_{max} 233 (3.96) nm

HRESIMS m/z 225.1491 $[\text{M}+\text{H}]^+$ (calcd. for $\text{C}_{13}\text{H}_{21}\text{O}_3$, 225.1491)

^1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 15 and 16.

화합물 34

Colorless gum



$[\alpha]_{\text{D}}^{20}$ -38.1 (*c* 0.25, MeOH)

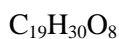
UV (MeOH) λ_{max} 221 (4.00), 279 (3.91) nm

HRESIMS m/z 409.1852 $[\text{M}+\text{Na}]^+$ (calcd. for $\text{C}_{19}\text{H}_{30}\text{O}_8\text{Na}$, 409.1838)

^1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 15 and 16.

화합물 35

Colorless gum



$[\alpha]_{\text{D}}^{20}$ +68.8 (*c* 1.0, MeOH)

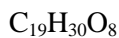
UV (MeOH) λ_{max} 237 (3.94) nm

HRESIMS m/z 409.1858 $[\text{M}+\text{Na}]^+$ (calcd. for $\text{C}_{19}\text{H}_{30}\text{O}_8\text{Na}$, 409.1838)

^1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 15 and 16.

화합물 36

Colorless gum



$[\alpha]_{\text{D}}^{20}$ +71.8 (*c* 1.0, MeOH)

UV (MeOH) λ_{\max} 237 (3.96) nm

HRESIMS m/z 409.1851 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{19}H_{30}O_8Na$, 409.1838)

1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 15 and 16

화합물 37

Colorless gum

$C_{10}H_{10}O_4$

$[\alpha]_D^{20} +24.1$ (c 0.5, MeOH)

UV (MeOH) λ_{\max} 256 (3.89), 354 (4.01) nm

HRESIMS m/z 195.0650 $[M+H]^+$ (calcd. for $C_{10}H_{11}O_4$, 195.0657)

1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 17 and 18.

화합물 38

Brown amorphous powder

$C_{10}H_9NO_2$

$[\alpha]_D^{20} -28.1$ (c 0.02, MeOH)

UV (MeOH) λ_{\max} 240 (3.93), 294 (3.73) nm

HRESIMS m/z 198.0522 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{10}H_9NO_2Na$, 198.0531)

1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 19 and 20.

화합물 39

Brown amorphous powder

$C_{11}H_{16}O_3$

$[\alpha]_D^{20} -31.6$ (c 0.01, MeOH)

UV (MeOH) λ_{\max} 218 (4.07) nm

HRESIMS m/z 241.1082 $[M+HCOO]^-$ (calcd. for $C_{12}H_{17}O_5$, 241.1076)

1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 17 and 18.

화합물 40

Brown amorphous powder



$[\alpha]_{\text{D}}^{20} +56.6$ (c 0.01, MeOH)

UV (MeOH) λ_{max} 211 (4.24) nm

HRESIMS m/z 195.1028 $[\text{M}-\text{H}]^-$ (calcd. for $\text{C}_{11}\text{H}_{15}\text{O}_3$, 195.1021)

^1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 17 and 18.

화합물 41

Yellow amorphous powder



$[\alpha]_{\text{D}}^{20} -28.1$ (c 0.1, MeOH)

UV (MeOH) λ_{max} 257 (4.21), 335 (3.68) nm

HRESIMS m/z 123.0557 $[\text{M}+\text{H}]^+$ (calcd. for $\text{C}_6\text{H}_7\text{N}_2\text{O}$, 123.0558)

^1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 17 and 18.

화합물 42

White amorphous crystal



$[\alpha]_{\text{D}}^{20} -48.4$ (c 1.0, MeOH)

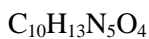
UV (MeOH) λ_{max} 255 (3.27) nm

HRESIMS m/z 268.1052 $[\text{M}+\text{H}]^+$ (calcd. for $\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_5\text{O}_4$, 268.1046)

^1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 19 and 20.

화합물 43

Colorless gum



$[\alpha]_D^{20}$ -78.9 (*c* 0.5, MeOH)

UV (MeOH) λ_{\max} 255 (4.07), 290 (3.97), 345 (4.08) nm

HRESIMS m/z 341.0876 $[M+H]^+$ (calcd. for $C_{15}H_{17}O_9$, 341.0873)

1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 17 and 18.

화합물 44

Colorless gum

$C_{15}H_{16}O_9$

$[\alpha]_D^{20}$ -14.9 (*c* 0.5, MeOH)

UV (MeOH) λ_{\max} 225 (3.97), 264 (3.08) nm

HRESIMS m/z 395.1330 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{17}H_{24}O_9Na$, 395.1318)

1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 17 and 18.

화합물 45

Colorless gum

$C_{17}H_{24}O_9$

$[\alpha]_D^{20}$ -34.9 (*c* 0.5, MeOH)

UV (MeOH) λ_{\max} 274 (3.82) nm

HRESIMS m/z 397.1475 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{17}H_{26}O_9Na$, 397.1475)

1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 17 and 18.

화합물 46

Yellow gum

$C_{12}H_{12}N_2O_2$

$[\alpha]_D^{20}$ -43.2 (*c* 0.25, MeOH)

UV (MeOH) λ_{\max} 274 (3.76), 293 (3.47) nm

HRESIMS m/z 217.0975 $[M+H]^+$ (calcd. for $C_{12}H_{13}N_2O_2$, 217.0977)

1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 17 and

18.

화합물 47

Brown amorphous powder



$[\alpha]_{\text{D}}^{20} +5.6$ (c 1.0, MeOH)

UV (MeOH) λ_{max} 218 (4.02), 263 (3.22) nm

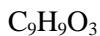
HRESIMS m/z 144.0664 $[\text{M}+\text{H}]^+$ (calcd. for $\text{C}_6\text{H}_{10}\text{NO}_3$, 144.0661)

^1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 19 and

20.

화합물 48

Brown amorphous powder



$[\alpha]_{\text{D}}^{20} -9.1$ (c 1.0, MeOH)

UV (MeOH) λ_{max} 281 (3.81) nm

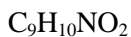
HRESIMS m/z 127.3090 $[\text{M}+\text{H}]^+$ (calcd. for $\text{C}_9\text{H}_{10}\text{O}_3$, 127.3095)

^1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 19 and

20.

화합물 49

Brown amorphous powder



$[\alpha]_{\text{D}}^{20} -35.0$ (c 0.1, MeOH)

UV (MeOH) λ_{max} 251 (3.32) nm

HRESIMS m/z 166.0860 $[\text{M}+\text{H}]^+$ (calcd. for $\text{C}_9\text{H}_{11}\text{NO}_2$, 166.0868)

^1H NMR (MeOH- d_4 , 500 MHz) ^{13}C NMR (MeOH- d_4 , 125 MHz): see table 19 and

20.

Table 5. ¹H NMR (500 MHz) data of butyrolactone and butanoate derivatives

position	1 ^a	2 ^b	3 ^b	position	4 ^b	5 ^b	6 ^b
3	2.80 (1H, dd, 17.8, 5.9), 2.18 (1H, d, 17.7)	2.68 (1H, dd, 18.0, 6.2) 2.17 (1H, d, 18.0)	2.65 (1H, dd, 18.0, 6.) 2.13 (1H, d, 18.0)	2	2.60 (1H, dd, 16.6, 4.6) 2.55 (1H, dd, 16.6, 8.1)	2.50 (1H, dd, 16.2, 4.8) 2.36 (1H, dd, 16.2, 8.3)	2.48 (1H, dd, 16.3, 5.0) 2.32 (1H, dd, 16.2, 8.1)
4	4.53 (1H, t, 6.1)	4.53 (2H, t, 6.1)	4.50 (2H, t, 6.0)	3	4.16 (1H, dd, 8.1, 4.6)	4.07 (1H, dd, 8.3, 4.8)	4.04 (1H, dd, 8.1, 4.8)
5	4.36 (1H, dd, 10.4, 4.3) 4.33 (1H, t, 9.6)	4.41 (1H, t, 9.4) 4.37 (1H, dd, 10.4, 4.3)	4.41 (1H, t, 10.0) 4.37 (1H, dd, 10.4, 4.2)	4	3.65 (2H, d, 4.8)	3.58 (2H, d, 4.8)	3.57 (2H, d, 4.8)
				OMe	3.42 (3H, s)	3.67 (3H, s)	3.67 (3H, s)
1'	4.75 (1H, d, 8.1)	4.64 (1H, d, 8.0)	4.52 (1H, d, 8.2)	1'	4.87 (1H, d, 8.0)	4.69 (1H, d, 8.0)	4.57 (1H, d, 8.0)
2'	4.61 (1H, dd, 9.8, 8.1)	4.77 (1H, dd, 9.8, 8.1)	4.69 (1H, t, 8.6)	2'	5.02 (1H, dd, 9.8, 8.0)	4.75 (1H, dd, 9.7, 8.0)	4.68 (1H, t, 9.0)
3'	4.99 (1H, t, 9.6)	5.11 (1H, t, 9.5)	3.54 (1H, t, 9.2)	3'	5.24 (1H, dd, 9.4, 9.6)	5.09 (1H, t, 9.5)	3.52 (1H, t, 9.0)
4'	3.40 (1H, m)	3.57 (1H, m)	4.35 (1H, t, 9.2)	4'	3.66 (1H, m)	3.56 (1H, m)	3.37 (1H, t, 9.0)
5'	3.37 (1H, m)	3.41 (1H, ddd, 9.8, 5.5, 2.2)	3.31 (1H, m)	5'	4.16 (1H, dd, 8.1, 4.8)	3.42 (1H, m)	4.16 (1H, m)
6'	3.68 (1H, dd, 11.1, 5.4) 3.49 (1H, m)	3.86 (1H, dd, 12.1, 2.2) 3.69 (1H, dd, 12.1, 5.5)	3.87 (1H, d, 12.1) 3.67 (1H, dd, 12.1, 5.4)	6'	3.90 (1H, dd, 12.0, 2.2) 3.74 (1H, dd, 12.1, 5.2)	3.83 (1H, dd, 12.0, 2.3) 3.70 (1H, dd, 11.0, 4.1)	3.87 (1H, d, 12.0) 3.68 (1H, m)
2''	6.98 (2H, d, 8.5)	6.97 (2H, d, 8.6)	7.11 (2H, d, 8.2)	2''	7.77 (2H, d, 8.8)	6.99 (2H, d, 8.8)	7.12 (2H, d, 8.3)
3''	6.69 (2H, d, 8.5)	6.72 (2H, d, 8.6)	6.75 (2H, d, 8.2)	3''	6.85 (2H, d, 8.8)	6.70 (2H, d, 8.8)	6.72 (2H, d, 8.3)
5''	6.69 (2H, d, 8.5)	6.72 (2H, d, 8.6)	6.75 (2H, d, 8.2)	5''	6.85 (2H, d, 8.8)	6.70 (2H, d, 8.8)	6.72 (2H, d, 8.3)
6''	6.98 (2H, d, 8.5)	6.97 (2H, d, 8.6)	7.11 (2H, d, 8.2)	6''	7.77 (2H, d, 8.8)	6.99 (2H, d, 8.8)	7.12 (2H, d, 8.3)
7''	3.38 (2H, m)	3.55 (2H, d, 15.5)	3.57 (2H, d, 9.7)	7''		3.59 (1H, d, 4.9) 3.32 (1H, m)	3.60 (2H, s)
2'''	6.91 (2H, d, 8.5)	7.22 (2H, d, 6.8)		2'''	7.24 (2H, m)	7.18 (2H, d, 8.3)	
3'''	6.68 (2H, d, 8.5)	7.30 (2H, t, 7.1)		3'''	7.22 (2H, m)	7.28 (2H, t, 6.3)	
4'''		7.26 (1H, d, 7.2)		4'''	7.17 (1H, t, 7.6)	7.24 (1H, d, 7.2)	
5'''	6.68 (2H, d, 8.5)	7.30 (2H, t, 7.1)		5'''	7.22 (2H, m)	7.28 (2H, t, 6.3)	
6'''	6.91 (2H, d, 8.5)	7.22 (2H, d, 6.8)		6'''	7.24 (2H, m')	7.18 (2H, d, 8.3)	
7'''	3.26 (2H, m)	3.25 (2H, d, 5.1)		7'''	3.71 (2H, s)	3.52 (1H, d, 14.8) 3.43 (1H, m)	

^a data were measured in DMSO-*d*₄^b data were measured in MeOH-*d*₄.

Table 6. ^{13}C NMR (125 MHz) data of butyrolactone and butanoate derivatives

position	1 ^a	2 ^b	3 ^b	position	4 ^b	5 ^b	6 ^b
1				1	173.2	173.2	173.3
2	175.5	178.1	178.2	2	37.6	37.7	37.7
3	34.9	36.1	36.1	3	79.1	79.7	79.5
4	74.8	76.6	76.5	4	65.4	65.2	65.2
5	73.7	75.8	75.9	OMe	52.2	52.3	52.4
1'	98.7	101.2	101.6	1'	101.7	102.1	102.4
2'	71.2	73.1	75.2	2'	74.5	73.3	75.5
3'	74.9	76.8	76.0	3'	76.7	77.0	76.1
4'	67.6	69.5	71.5	4'	69.8	69.6	71.6
5'	76.6	78.1	78.3	5'	78.0	77.8	78.0
6'	60.2	62.2	62.6	6'	62.1	62.2	62.5
1''	123.8	126.0	126.4	1''	125.1	126.0	126.4
2''	130.1	131.6	131.6	2''	134.1	131.7	131.7
3''	115.0	116.5	116.4	3''	117.1	116.4	116.3
4''	156.2	157.8	157.7	4''	166.1	157.8	157.6
5''	115.0	116.5	116.4	5''	117.1	116.4	116.3
6''	130.1	131.6	131.6	6''	134.1	131.7	131.7
7''	39.1	41.1	41.4	7''	185.4	41.0	41.1
8''	170.1	172.4	173.1	8''	164.7	172.7	173.3
1'''	124.2	135.5		1'''	135.2	135.4	
2'''	130.2	130.6		2'''	130.7	130.6	
3'''	115.3	129.7		3'''	129.6	129.6	
4'''	156.1	128.2		4'''	128.1	128.1	
5'''	115.3	129.7		5'''	129.6	129.6	
6'''	130.2	130.6		6'''	130.7	130.6	
7'''	39.4	42.0		7'''	41.9	41.8	
8'''	170.1	172.9		8'''	172.9	172.9	

^a data were measured in DMSO- d_4 .

^b data were measured in MeOH- d_4 .

Table 7. ¹H NMR (500 MHz) data of inositol derivatives

position	7	8	9	10	11	12	13	14
1	5.27 (1H, t, 3.7)	5.19 (1H, t, 9.8)	5.08 (1H, t, 3.7)	3.97 (1H, t, 3.8)	3.82 (1H, t, 3.7)	5.14 (1H, t, 3.7)	5.07 (1H, dd, 9.6, 2.1)	5.10 (1H, t, 9.5)
2	5.07 (1H, dd, 10.0, 3.3)	3.92 (1H, t, 9.8)	5.25 (1H, t, 3.6)	4.87 (1H, dd, 9.4, 3.8)	3.60 (1H, dd, 9.7, 3.1)	3.91 (1H, dd, 9.8, 3.4)	4.01 (1H, d, 1.8)	3.49 (1H, dd, 10.0, 2.7)
3	3.63 (1H, overlap)	5.10 (1H, dd, 10.2, 3.1)	4.83 (1H, dd, 10.0, 3.3)	3.89 (1H, dd, 10.0, 9.4)	3.78 (1H, t, 9.6)	3.56 (1H, t, 9.5)	3.56 (1H, dd, 9.5, 2.6)	3.80 (1H, t, 3.3)
4	3.63 (1H, overlap)	4.04 (1H, t, 3.5)	3.64 (1H, overlap)	3.69 (1H, dd, 10.0, 9.5)	5.23 (1H, t, 10.4)	3.82 (1H, t, 9.5)	5.07 (1H, dd, 9.6, 2.1)	5.14 (1H, t, 3.3)
5	3.52 (1H, dd, 9.6, 3.2)	3.92 (1H, t, 3.2)	3.54 (1H, overlap)	5.10 (1H, dd, 10.1, 3.4)	5.13 (1H, dd, 10.5, 3.3)	4.81 (1H, dd, 10.2, 3.1)	4.01 (1H, d, 1.8)	3.94 (1H, dd 10.0, 3.0)
6	3.81 (1H, t, 3.5)	3.87 (1H, dd, 9.9, 3.1)	3.71 (1H, dd, 9.7, 3.3)	5.26 (1H, t, 3.8)	5.27 (1H, t, 3.7)	3.98 (1H, t, 3.1)	3.56 (1H, dd, 9.5, 2.6)	3.60 (1H, overlap)
2'	7.10 (2H, d, 8.5)	7.13 (2H, d, 8.6)	7.10 (2H, d, 8.5)	7.13 (2H, d, 8.6)	7.11 (2H, d, 8.5)	7.12 (2H, d, 8.5)	7.12 (1H, d, 8.5)	7.12 (2H, d, 8.5)
3'	6.74 (2H, d, 8.5)	6.72 (2H, d, 8.5)	6.71 (2H, d, 8.5)	6.74 (2H, d, 8.6)	6.73 (2H, d, 8.5)	6.73 (2H, d, 8.5)	6.73 (1H, d, 8.5)	6.73 (2H, d, 8.5)
5'	6.74 (2H, d, 8.5)	6.72 (2H, d, 8.5)	6.71 (2H, d, 8.5)	6.74 (2H, d, 8.6')	6.73 (2H, d, 8.5)	6.73 (2H, d, 8.5)	6.73 (1H, d, 8.5)	6.73 (2H, d, 8.5)
6'	7.10 (2H, d, 8.5)	7.13 (2H, d, 8.6)	7.10 (2H, d, 8.5)	7.13 (2H, d, 8.6)	7.11 (2H, d, 8.5)	7.12 (2H, d, 8.5)	7.12 (1H, d, 8.5)	7.12 (2H, d, 8.5)
7'	3.48 (2H, d, 2.3)	3.64 (2H, d, 2.3)	3.61 (2H, d, 4.3)	3.64 (2H, d, 2.4)	3.64 (2H, d, 2.4)	3.63 (2H, d, 3.6)	3.63 (1H, d, 3.6)	3.63 (2H, d, 3.6)
2''	7.00 (2H, d, 8.5)	7.12 (2H, d, 8.6)	7.10 (2H, d, 8.5)	6.99 (2H, d, 8.6)	7.13 (2H, d, 8.5)	7.10 (2H, d, 8.5)	7.12 (1H, d, 8.5)	7.10 (2H, d, 8.5)
3''	6.70 (2H, d, 8.5)	6.72 (2H, d, 8.5)	6.71 (2H, d, 8.5)	6.70 (2H, d, 8.6)	6.67 (2H, d, 8.5)	6.71 (2H, d, 8.5)	6.73 (1H, d, 8.5)	6.71 (2H, d, 8.5)
5''	6.70 (2H, d, 8.5)	6.72 (2H, d, 8.5)	6.71 (2H, d, 8.5)	6.70 (2H, d, 8.6)	6.67 (2H, d, 8.5)	6.71 (2H, d, 8.5)	6.73 (1H, d, 8.5)	6.71 (2H, d, 8.5)
6''	7.00 (2H, d, 8.5)	7.12 (2H, d, 8.6)	7.10 (2H, d, 8.5)	6.99 (2H, d, 8.6)	7.13 (2H, d, 8.5)	7.10 (2H, d, 8.5)	7.12 (1H, d, 8.5)	7.10 (2H, d, 8.5)
7''	3.36 (2H, m)	3.63 (2H, d, 1.8)	3.50 (2H, m)	3.35 (2H, s)	3.64 (2H, d, 2.4)	3.60 (2H, d, 3.2)	3.63 (2H, d, 3.6)	3.60 (2H, overlap)
2'''			7.10 (2H, d, 8.5')	7.11 (2H, d, 8.6)	7.08 (2H, d, 8.5)			
3'''			6.74 (2H, d, 8.5)	6.73 (2H, d, 8.6)	6.74 (2H, d, 8.5)			
5'''			6.74 (2H, d, 8.5)	6.73 (2H, d, 8.6)	6.74 (2H, d, 8.5)			
6'''			7.10 (2H, d, 8.5)	7.11 (2H, d, 8.6)	7.08 (2H, d, 8.5)			
7'''			3.50 (2H, m)	3.51 (2H, d, 1.6)	3.64 (2H, d, 2.4)			

All data were measured in MeOH-*d*₄

Table 8. ^{13}C NMR (125 MHz) data of inositol derivatives

Position	7	8	9	10	11	12	13	14
1	72.4	77.1	72.4	68.6	70.8	75.5	75.6	76.9
2	73.7	70.5	69.0	75.4	72.5	70.3	71.4	71.0
3	72.7	75.8	73.6	72.0	72.3	75.1	72.5	70.8
4	74.4	71.0	72.3	72.8	73.9	72.1	75.6	75.5
5	72.5	73.9	74.6	73.4	71.5	75.8	71.4	70.5
6	71.0	70.6	70.7	72.2	72.0	68.3	72.5	73.1
1'	126.3	126.7	126.1	126.4	126.5	126.4	126.5	126.4
2', 6'	131.7	131.7	131.6	131.6	131.6	131.6	131.6	131.6
3', 5'	116.5	116.3	116.5	116.5	116.5	116.4	116.3	116.4
4'	157.8	157.6	157.6	157.8	157.8	157.6	157.5	157.6
7'	41.4	41.2	40.9	40.9	41.3	41.1	41.0	41.1
8'	173.5	174.2	172.8	173.9	173.2	173.9	174.0	173.9
1''	126.2	126.5	126.0	126.2	125.9	126.2	126.5	126.2
2'', 6''	131.5	131.6	131.5	131.7	131.7	131.6	131.6	131.6
3'', 5''	116.3	116.2	116.5	116.3	116.3	116.3	116.3	116.3
4''	157.6	157.5	157.9	157.6	157.6	157.6	157.5	157.6
7''	40.9	41.0	41.2	40.9	40.6	40.9	41.0	40.9
8''	172.6	173.8	172.2	173.5	172.8	173.3	174.0	173.3
1'''			126.1	126.1	126.1			
2''', 6'''			131.7	131.6	131.6			
3''', 5'''			116.3	116.3	116.6			
4'''			157.6	157.6	157.7			
7'''			40.8	41.3	41.4			
8'''			173.4	172.6	172.6			

All data were measured in $\text{MeOH-}d_4$

Table 9 ^1H NMR (500 MHz) data of flavonoids

position	16	17	18	19
3	6.91 (1H,s)	6.92 (1H,s)	7.00 (1H,s)	6.66 (1H,s)
6	6.19 (1H, d, 2.1)	6.21 (1H, d, 2.0)	6.22 (1H, s)	6.18 (1H, d, 2.1)
8	6.51 (1H, d, 2.1)	6.48 (1H, d, 2.0)	6.58 (1H, s)	6.44 (1H, d, 2.1)
2'	7.56 (1H, s)	7.16 (1H, s)	7.34 (2H, s)	7.40 (1H, s)
5'	6.93 (1H, d, 8.9)			7.41 (1H, d, 8.4)
6'	7.57 (1H, dd, 8.9, 2.1)	7.16 (1H, s)	7.34 (2H, s)	7.41 (1H, dd, 8.4, 2.3)
OMe	3.89 (3H, s, 4'-OMe)	3.88 (3H, s, 3'-OMe)	3.90 (6H, s, 3', 5'-OMe)	
		3.75 (3H, s, 4'-OMe)		

All data were measured in $\text{DMSO}-d_6$ Table 10. ^{13}C NMR (125 MHz) data of flavonoids

Position	16	17	18	19
2	163.6	163.1	164.1	164.3
3	103.2	104.6	104.2	103.3
4	181.8	181.8	182.2	182.1
5	161.4	161.4	161.8	161.9
6	98.8	98.9	99.3	99.2
7	164.1	164.3	164.6	164.5
8	94	93.8	94.6	94.3
9	157.3	157.3	157.8	157.7
10	103.7	103.8	104	104.1
1'	121.5	125.8	120.8	122
2'	110.1	102.1	104.8	113.8
3'	148	150.8	148.6	146.1
4'	150.7	139.6	140.3	150.1
5'	115.7	153.5	148.6	116.4
6'	120.3	107.6	104.8	119.4
OMe	55.9	56.1	56.8	
		60.0		

All data were measured in $\text{DMSO}-d_6$

Table 11. ¹H NMR (500 MHz) data of flavonoids

Position	20 ^a	21 ^a	22 ^a	23 ^a	Position	15 ^b	24 ^b
3	7.05 (1H, s)	7.06 (1H, s)	7.05 (1H, s)	7.07 (1H, s)	2, 6	7.06 (2H, d, 8.5)	7.07 (2H, d, 8.4)
6	6.22 (1H, d, 1.8)	6.23 (1H, s)	6.23 (1H, s)	6.23 (1H, s)	3, 5	6.67 (2H, d, 8.5)	6.68 (2H, d, 8.4)
8	6.58 (1H, d, 1.8)	6.58 (1H, s)	6.58 (1H, s)	6.58 (1H, s)	7	2.86 (2H, t, 10.8)	2.88 (2H, t, 7.4)
2'	7.31 (2H, s)	7.31 (2H, s)	7.30 (2H, s)	7.32 (2H, s)	8	3.42 (2H, m)	3.44 (2H, m)
6'	7.31 (2H, s)	7.31 (2H, s)	7.30 (2H, s)	7.32 (2H, s)	3'	6.32 (1H, s)	6.18 (1H, d, 2.2)
2''	7.16 (2H, d, 8.4)	6.85 (1H, s)	6.86 (1H, s)	7.07 (2H, d, 8.4)	5'		5.95 (1H, d, 2.2)
3''	6.69 (2H, d, 8.4)		6.68 (2H, d, 8.4)		1''	5.02 (1H, d, 7.6)	5.04 (1H, d, 7.2)
5''		6.73 (2H, m)	6.72 (2H, m)		2''-5''	3.49-3.37 (4H, m)	3.49-3.38 (4H, m)
6''		6.73 (2H, m)	6.72 (2H, m)		6''	3.93 (1H, dd, 9.5, 4.9) 3.72 (1H, dd, 12.1, 5.9)	3.91 (1H, dd, 12.0, 1.6) 3.72 (1H, dd, 12.1, 5.4)
7''	4.78 (1H, t, 4.4)	4.42 (1H, d, 6.2)	4.42 (1H, d, 3.8)	4.85 (1H, t, 8.9)	1'''	4.37 (2H, s)	
8''	4.31 (1H, dd, 8.8, 4.9)	4.28 (1H, dd, 10.5, 4.9)	4.37 (1H, d, 4.9)	4.21 (1H, dd, 9.0, 4.4)	3'''	3.99 (1H, dd, J = 9.5, 4.9)	
9''	3.72 (1H, m)	3.56 (1H, m)	3.70 (1H, m)	3.67 (1H, m)	4'''	2.40 (1H, m), 2.16 (1H, m)	
	3.48 (1H, m)	3.17 (1H, d, 4.7),	3.52 (1H, m),	3.21 (1H, m)	5'''	2.07 (1H, m), 1.91 (1H, m)	
3',5'-OMe	3.87 (6H, s, 3',5'-OMe)	3.86 (6H, s, 3',5'-OMe)	3.86 (6H, s, 3',5'-OMe)	3.85 (6H, s, 3',5'-OMe)	6'''	3.64 (1H, m), 3.21 (1H, m)	
3''-OMe		3.74 (3H, s, 3''-OMe)	3.74 (3H, s, 3''-OMe)				
7''-OMe		3.06 (3H, s, 7''-OMe)	3.15 (3H, s, 7''-OMe)				

^a data were measured in DMSO-*d*₆.^b data were measured in MeOH-*d*₄.

Table 12. ^{13}C NMR (125 MHz) data of flavonoid derivatives

Position	20^a	21^a	22^a	23^a	Position	15^b	24^b
2	163.0	163.2	163.1	163.1	1	134.0	134.0
3	104.8	104.6	104.2	104.2	2	130.5	130.5
4	181.8	181.9	181.9	181.9	3	116.2	116.2
5	161.4	161.4	161.4	161.4	4	156.5	156.5
6	98.9	98.9	98.9	98.9	5	30.9	116.2
7	164.3	164.0	161.4	164.3	6	47.1	130.5
8	94.3	94.3	94.3	94.3	7	206.6	30.9
9	157.3	157.4	157.4	157.4	8	106.8	47.1
10	103.8	103.8	103.8	103.8	9	162.4	206.6
1'	125.2	124.8	125.2	125.2	1'	95.5	106.8
2'	104.2	104.1	104.2	104.2	2'	166.0	162.4
3'	152.9	152.9	152.9	152.9	3'	98.4	95.5
4'	139.3	140.7	139.2	139.9	4'	167.7	166.0
5'	152.9	152.9	152.9	152.9	5'	48.4	98.4
6'	104.2	104.1	104.2	104.2	6'	134.0	167.7
1''	132.5	129.5	129.2	132.3	1''	102.1	102.1
2''	127.9	111.3	111.4	127.8	2''	74.8	74.8
3''	114.3	147.3	147.2	114.3	3''	78.6	78.6
4''	156.2	146.0	145.9	156.2	4''	71.1	71.1
5''	114.3	115.0	114.8	114.3	5''	78.5	78.5
6''	127.9	120.0	120.4	127.8	6''	62.5	62.5
7''	71.9	83.5	82.3	71.5	1'''	48.4	
8''	86.4	85.4	85.2	87.0	2'''		
9''	60.0	60.6	59.9	60.3	3'''	69.8	
3',5'-OMe	56.3	56.3	56.5	56.3	4'''	30.3	
3''-OMe		55.5	55.5		5'''	24.9	
7''-OMe		56.2	56.3		6'''	55.4	
					7'''	173.7	

^a data were measured in DMSO- d_6 .^b data were measured in MeOH- d_4 .

Table 13. ¹H NMR (500 MHz) data of flavonoid glycosides

position	25 ^a	26 ^b	27 ^b	28 ^b
3	6.75 (1H, s)		6.61 (1H, s)	6.62 (1H, s)
6	6.45 (1H, d, 2.0)	6.20 (1H, d, 2.0)	6.60 (1H, d, 2.1)	6.51 (1H, d, 1.9)
8	6.74 (1H, d, 2.0)	6.45 (1H, d, 2.0)	6.80 (1H, d, 2.1)	6.81 (1H, d, 1.9)
2'	7.41 (1H, d, 2.0)	7.93 (1H, d, 2.0)	7.43 (1H, s)	7.42 (1H, s)
5'	6.91 (1H, d, 8.4)	6.92 (1H, d, 8.5)	6.93 (1H, d, 8.8)	6.91 (1H, d, 8.3)
6'	7.45 (1H, dd, 8.4, 2.0)	7.58 (1H, dd, 8.5, 2.0)	7.44 (1H, m)	7.42 (1H, m)
1''	5.08 (1H, d, 7.3)	5.68 (1H, d, 7.3)	5.08 (1H, d, 7.1)	5.07 (1H, d, 5.4)
6''	3.84 (1H, d, 10.7) 3.62 (1H, m)	3.57 (1H, m), 3.34 (1H, m)	4.20 (1H, d, 10.0) 3.82 (1H, m)	3.94 (1H, d, 11.1) 3.72 (1H, dd, 11.1, 5.7)
1'''	4.54 (1H, s)	4.79 (1H, d, 4.7)	4.37 (1H, d, 7.6)	
5'''		3.68 (1H, dd, 11.5, 6.1) 3.21 (1H, d, 8.9)		
6'''	1.07 (3H, d, 6.2)		3.87 (1H, d, 11.9, 1.9) 3.68 (1H, dd, 11.9, 6.0)	
OMe		3.85 (3H, s, -OMe)		

^a data were measured in DMSO-*d*₆.^b data were measured in MeOH-*d*₄.

Table 14. ^{13}C NMR (125 MHz) data of flavonoid glycosides

position	25 ^a	26 ^b	27 ^b	28 ^b
2	162.9	156.0	167.1	167.0
3	103.2	132.8	104.3	104.2
4	181.9	177.2	184.2	184.2
5	161.2	161.2	163.1	163.0
6	100.5	98.7	101.3	101.2
7	164.5	164.2	164.9	164.9
8	94.7	93.7	96.3	96.1
9	156.9	156.3	159.0	159.1
10	105.3	104.0	107.2	107.2
1'	121.4	121.0	123.6	123.6
2'	113.5	113.2	114.4	114.3
3'	145.7	146.9	147.2	147.2
4'	149.9	149.5	151.3	151.4
5'	116	115.2	117.0	116.9
6'	119.2	122.3	120.7	120.6
1''	99.8	98.5	101.7	101.7
2''	73.1	79.6	75.2	74.8
3''	76.2	77.1	78.2	77.9
4''	69.5	69.6	71.7	71.3
5''	75.5	77.4	77.3	78.5
6''	66.0	60.4	70.3	62.5
1'''	99.5	102.3	105.1	
2'''	70.7	70.6	74.8	
3'''	70.3	72.0	77.8	
4'''	72.0	65.8	71.4	
5'''	68.3	62.4	78.1	
6'''	17.8		62.9	
OMe		55.6		

^a data were measured in DMSO- d_6 .

^b data were measured in MeOH- d_4 .

Table 15 ¹H NMR (500 MHz) data of megastigmane and sesquiterpene derivatives

position	32	33	34	35	36	position	29	30	31
2	2.31 (1H, d, 5.1) 1.62 (1H, dd, 14.3, 9.2)	1.82 (1H, d, 12.6) 1.48 (1H, dd, 12.4, 2.4)	1.94 (1H, d, 12.6) 1.65 (1H, dd, 12.4, 3.2)	2.53 (1H, d, 17.0) 2.15 (1H, dd, 17.0)	2.62 (1H, d, 16.8) 2.17 (1H, d, 16.8)	1	5.82 (1H, d, 9.9)	5.84 (1H, dd, 12.8, 3.7)	3.55 (1H, dd, 11.7, 4.0)
3	3.76 (1H, m)	3.79 (1H, m)	4.02 (1H, dt, 12.8, 3.5)			2	3.39 (1H, m) 2.28 (1H, m)	3.39 (1H, m) 2.32 (1H, m)	1.98 (1H, m) 1.77 (1H, q, 12.2)
4	1.58 (1H, ddd, 12.8, 3.2, 1.7) 1.26 (1H, dd, 9.8, 2.9)	3.88 (1H, d, 3.5)	4.13 (1H, d, 3.4)	5.87 (1H, m)	5.87 (1H, m)	3	2.34 (1H, m) 2.27 (1H, m)	2.37 (1H, m) 2.30 (1H, m)	3.77 (1H, m)
7	7.17 (1H, d, 15.8)	7.28 (1H, d, 16.4)	7.28 (1H, d, 16.4)	5.86 (1H, m)	5.98 (1H, d, 15.6)	4			2.33 (1H, dd, 12.4, 5.2)
8	6.18 (1H, d, 15.8)	6.15 (1H, d, 16.5)	6.14 (1H, d, 16.5)	5.86 (1H, m)	5.73 (1H, dd, 15.6, 7.2)	5	4.88 (1H, m)	4.98 (1H, dd, 10.1, 1.1)	1.63 (1H, dd, 11.5, 4.4)
9				4.42 (1H, m)	4.54 (1H, m)	6	4.73 (1H, t, 9.7)	4.74 (1H, dd, 10.1, 8.7)	4.16 (1H, t, 11.1)
10	2.28 (3H, s)	2.32 (3H, s)	2.32 (3H, s)	1.29 (3H, d, 6.4)	1.29 (3H, d, 6.4)	7	1.77 (1H, d, 11.9)	2.72 (1H, m)	2.54 (1H, td, 11.3, 3.1)
11	1.19 (3H, s)	1.09 (3H, s)	1.10 (3H, s)	1.03 (3H, s)	1.02 (3H, s)	8	2.03 (1H, m) 1.93 (1H, dd, 12.9, 6.4)	2.23 (1H, m) 2.09 (1H, m)	2.04 (1H, m) 1.55 (1H, dd, 12.7, 2.7)
12	0.96 (3H, s)	1.13 (3H, s)	1.15 (3H, s)	1.04 (3H, s)	1.04 (3H, s)	9	2.82 (1H, d, 11.7) 2.03 (1H, m)	2.89 (1H, dd, 12.2, 5.8) 2.13 (1H, m)	2.06 (1H, m) 1.33 (1H, m)
13	1.18 (3H, s)	1.88 (3H, s)	1.89 (3H, s)	1.92 (3H, d, 1.2)	1.95 (3H, d, 1.2)	11	2.36 (1H, m)		
1'			4.51 (1H, d, 7.8)	4.34 (1H, d, 7.8)	4.27 (1H, d, 7.7)	13	1.21 (3H, d, 7.0)	6.18 (1H, d, 3.6) 5.64 (1H, d, 3.6)	5.99 (1H, d, 3.2) 5.48 (1H, d, 3.2)
2'-5'			3.38-3.23 (4H, m)	3.34-3.17 (4H, m)	3.37-3.14 (4H, m)	14			1.06 (3H, s)
6'			3.87 (1H, d, 11.6) 3.68 (1H, d, 10.9, 5.0)	3.85 (1H, dd, 11.7, 1.7) 3.62 (1H, dd, 11.7, 5.5)	3.85 (1H, dd, 12.0, 1.8) 3.63 (1H, dd, 11.9, 6.2)	15	1.63 (3H, s)	1.64 (3H, d, 1.2)	1.00 (3H, d, 7.5)
						1'	5.54 (1H, d, 8.0)	5.54 (1H, d, 8.0)	4.33 (1H, d, 7.8)
						2'-5'	3.34-3.36 (4H, m')	3.43-3.36 (4H, m)	3.35-3.14 (4H, m)
						6'	3.83 (1H, d, 12.6)	3.83 (1H, dd, 12.2, 1.8)	3.87 (1H, d, 11.6)
							3.69 (1H, dd, 12.0, 4.5)	3.69 (1H, dd, 12.0, 4.5)	3.64 (1H, m)

All data were measured in MeOH-*d*₄

Table 16. ^{13}C NMR (125 MHz) data of megastigmane and sesquiterpene derivatives

Position	32	33	34	35	36	Position	29	30	31
1	36.2	37.0	38.0	42.5	42.5	1	150.0	149.8	84.0
2	41.4	42.4	40.2	50.8	50.8	2	27.7	27.8	31.8
3	64.5	66.8	75.8	201.3	201.4	3	40.2	40.1	71.5
4	47.8	71.9	70.1	127.3	127.2	4	143.3	142.1	35.6
5	68.9	134.3	132.5	167.4	167.3	5	127.5	127.4	49.4
6	71.0	138.7	141.4	80.1	80.1	6	83.4	84.0	81.7
7	145.5	142.5	144.3	131.6	133.8	7	55.7	51.3	52.2
8	133.9	133.7	134.8	135.4	133.9	8	31.4	31.5	22.6
9	200.4	197.7	201.0	77.4	75.0	9	37.5	37.4	40.5
10	27.5	27.4	27.9	21.3	22.4	10	132.0	132.9	42.1
11	29.9	27.6	27.3	23.5	23.6	11	43.6	144.7	142.0
12	25.2	30.0	30.3	24.8	24.8	12	181.7	172.9	173.0
13	20.1	20.2	20.2	19.7	19.7	13	13.4	120.5	117.2
1'			102.9	102.8	101.3	14	168.0	168.0	16.4
2'			75.4	75.3	74.7	15	17.3	17.4	9.5
3'			78.1	78.2	78.5	1'	95.5	95.6	101.9
4'			71.7	71.7	71.8	2'	74.2	74.1	75.1
5'			78.2	78.1	78.3	3'	78.5	78.5	78.3
6'			62.8	62.9	62.9	4'	71.2	71.3	71.9
						5'	79.0	79.0	78.0
						6'	62.5	62.5	62.1

All data were measured in $\text{MeOH-}d_4$

Table 17 ^1H NMR (500 MHz) data of others

Position	37^b	43^b	44^b	45^b	Position	41^b	46^a	Position	39^b	40^b
2	7.03 (1H, d, 1.5)		6.75 (2H, s)	6.55(2H, s)	2	8.35(1H, s)		2	1.99 (1H, d, 14.4) 1.53 (1H, dd, 14.4, 3.6)	2.01 (1H, ddd, 13.0, 4.2, 2.2) 1.28 (1H, m)
3		6.29 (1H, d, 9.5)			4	8.17 (1H, d, 7.3)	7.44 (1H, d, 7.8)	3	4.22 (1H, m, H-3)	4.10 (1H, tt, 11.5, 4.2)
4		7.83 (1H, d, 9.5)			5	7.20 (1H, m)	6.98 (1H, t, 7.8)	4	2.42 (1H, d, 13.6) 1.75 (1H, m)	2.47 (1H, ddd, 11.7, 3.9, 2.2) 1.42 (1H, t, 11.6)
5	6.77 (1H, d, 8.1)	7.04 (1H, s)			6	7.20 (1H, m)	7.06 (1H, t, 7.8)	7	5.75 (1H, s)	5.78 (1H, s)
6	7.03 (1H, dd, 8.1, 1.5)		6.75 (2H, s)	6.55 (2H, s, H-2, 6)	7	7.48 (1H, d, 7.3)	7.32 (1H, d, 7.8)	9	1.47 (3H, s)	1.29 (3H, s)
7	7.54 (1H, d, 15.9)		6.55 (1H, d, 15.9)	2.64 (2H, m)	10		4.17 (2H, d, 15.4)	10	1.76 (3H, s)	1.59 (3H, s)
8	6.26 (1H, d, 15.9)	7.20 (1H, s)	6.33 (1H, dt, 15.9, 5.6)	1.83 (2H, m)	11	4.58 (2H, d, 5.4)	3.55 (1H, dd, 10.9, 4.4)	11	1.28 (3H, s)	1.31 (3H, s)
9			4.23 (2H, dd, 5.6, 1.5)	3.57 (2H, t, 6.4)	13		3.11 (1H, dd, 15.9, 4.5) 2.78 (1H, dd, 15.5, 10.5)			
OMe or 10	3.76 (3H, s, -OMe)		3.86 (6H, s, -OMe)	3.83 (6H, s, -OMe)						
1'		4.99 (1H, d, 7.3)	4.88 (1H, d, 7.6)	4.80 (1H, d, 7.6)						
2'-5'		3.53-3.26 (4H, m)	3.48-3.20 (4H, m)	3.48-3.20 (4H, m)						
6'		3.93 (1H, dd, 12.1, 2.2) 3.72 (1H, dd, 12.1, 5.7)	3.78 (1H, dd, 12.0, 2.3) 3.66 (1H, dd, 12.0, 5.2)	3.78 (1H, m) 3.67 (1H, m)						

^a data were measured in DMSO-*d*₆.^b data were measured in MeOH-*d*₄.

Table 18. ^{13}C NMR (125 MHz) data of others

Position	37^b	43^b	44^b	45^b	Position	41^b	46^a	Position	39^b	40^b
1	127.8		135.3	140.5	1			1	37.3	36.3
2	115.2	163.7	105.5	107.4	2	133.3	128.1	2	48.1	50.9
3	146.9	114.8	154.4	154.2	3	113.1	106.8	3	67.3	65.4
4	149.7	145.7	135.9	134.5	4	121.1	117.7	4	45.5	50.0
5	116.6	114.0	154.4	154.2	5	121.7	118.7	5	89.1	88.7
6	123.0	145.6	105.5	107.4	6	122.7	121.2	6	185.8	184.0
7	147.0	150.5	131.4	33.5	7	112.1	111.1	7	113.4	113.8
8	114.9	105.4	130.1	35.6	8	136.2	136.2	8	174.5	174.1
9	169.9	149.7	63.7	62.2	9	125.4	126.7	9	27.1	25.4
OMe or10	52.1	115.4	57.1	57.1	10	194.3	23.1	10	27.5	25.9
1'		103.1	105.4	105.7	11	65.2	56.7	11	31.1	30.4
2'		74.8	75.8	75.8	12					
3'		78.6	78.5	78.4	13		40.5			
4'		71.3	71.4	71.4	14		169.6			
5'		77.5	77.9	77.9						
6'		62.4	62.6	62.6						

^a data were measured in DMSO- d_6 .^b data were measured in MeOH- d_4 .

Table 19. ¹H NMR (125 MHz) data of others

Position	38	42	47	48	49
1				9.54 (1H, s)	
2	9.03 (1H, s)	8.18 (1H, s)	4.30 (1H, dd, 9.0, 4.4)		
3			2.47 (1H, m), 2.16 (1H, m)	7.39 (1H, d, 3.6)	
4	8.69 (1H, d, 4.0)		2.33 (2H, m)	6.59 (1H, d, 3.6)	7.28-7.39 (5H, m)
5	7.55 (1H, ddd, 8.0, 4.9, 0.5)				
6	8.29 (1H, m)			4.61 (2H, s)	
7					3.78 (1H, dd, 9.0, 4.3) 4.00 (1H, dd, 14.5, 9.0)
8		8.32 (1H, s)			4.61 (1H, s)
OCH ₃			3.76 (3H, s)		
1'		5.96 (1H, d, 6.5)			
2'		4.74 (1H, dd, 6.4, 5.2)			
3'		4.32 (1H, dd, 5.0, 2.5)			
4'		4.17 (1H, dd, 5.0, 2.5)			
5'		3.89 (1H, dd, 12.5, 2.4) 3.75 (1H, dd, 12.6, 2.6)			

All data were measured in MeOH-*d*₄

Table 20. ^{13}C NMR (125 MHz) data of others

Position	38	42	47	48	49
1	131.5			179.5	137.4
2	149.6	153.6	57.1	154.0	130.1
3			25.9	124.8	130.5
4	152.9	150.1	30.4	111.0	128.5
5	125.3	121.1	181.2	163.3	130.5
6	137.5	157.7	174.6	57.8	130.1
7	169.9				38.4
8		142.1			57.7
9					179.5
OCH ₃			53.0		
1'		91.4			
2'		75.6			
3'		72.8			
4'		88.3			
5'		63.6			

All data were measured in MeOH- d_4

2.3 알파글루코시데이즈 억제 활성

알파글루코시데이즈 억제 활성을 측정하기 위하여 문헌의 방법 (Escadon-Rivera et al., 2012) 을 수정하여 실시하였다. 알파글루코시데이즈 효소를 0.11 U/ml 가 되도록 50mM PBS buffer로 희석하여 stock solution을 만든다. 시료 (10 μ l) 와 효소 stock solution (45 μ l)을 plate에 넣고 36 $^{\circ}$ C에 방치한다. 그 후 1.35 mM *p*-nitrophenyl- α -D-glucopyranoside (*p*NPG) 45 μ l를 넣고 10분간 반응을 시킨 후, microplate reader로 405 nm에서 2.5분 단위로 흡광도를 측정한다. PBS 버퍼를 control로 사용하며, acarbose를 positive control로 사용한다. 억제률은 $[1-(\Delta\text{Abs}_{\text{sample}}/\Delta\text{Abs}_{\text{control}})] \times 100$ 로 계산하였다. 모든 실험은 세 번 반복하였으며, IC₅₀ 값은 최소 여섯 개의 농도 하에 구하였다.

저해 유형은 Lineweaver-Burk plot 을 통해 구하였다. 여러 농도의 *p*NPG 를 405 nm 에서 1 분 단위로 측정하였다.

III. 결과 및 고찰

1. 화합물 구조동정

1.1 화합물 1의 구조

화합물 1 은 무색무정형 화합물로 분자량 m/z 555.1465 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{26}H_{28}O_{12}Na$, 555.1478) 를 통해 분자식 $C_{26}H_{28}O_{12}$ 을 구하였다. 1H NMR spectrum에서 두 개의 1, 4-치환체 [δ_H 6.98 (2H, d, $J = 8.5$ Hz), 6.91 (2H, d, $J = 8.5$ Hz), 6.69 (2H, d, $J = 8.5$ Hz), 6.68 (2H, d, $J = 8.5$ Hz)], 하나의 anomeric proton [δ_H 4.75 (1H, d, $J = 8.1$ Hz)], 하나의 methylene group [δ_H 2.80 (1H, dd, $J = 17.8, 5.9$ Hz), 2.18 (1H, d, $J = 17.7$ Hz)], 두 개의 oxygenated methylene group [δ_H 4.36 (1H, dd, $J = 10.4, 4.3$ Hz), 4.33 (1H, t, $J = 9.6$ Hz), 3.68 (1H, dd, $J = 11.1, 5.4$ Hz), 3.49 (1H, m)], 두 개의 carbonyl methylene proton (δ_H 3.38 (2H, m), 3.26 (2H, m) 그리고 다섯 개의 oxygenated proton [δ_H 4.99 (1H, t, $J = 9.6$ Hz), 4.61 (1H, dd, $J = 9.8, 8.1$ Hz), 4.53 (1H, dd, $J = 6.1, 4.6$ Hz), 3.40 (1H, m), 3.37 (1H, m)]을 확인하였다. ^{13}C NMR spectrum에서 여덟 개의 aromatic carbon (δ_C 156.2, 156.1, 130.2, 130.1, 124.2, 123.8, 115.3, 115.0), 세 개의 carbonyl carbon (δ_C 175.5, 170.1, 170.1), 두 개의 carbonyl methylene carbon (δ_C 39.4, 39.1), 하나의 methylene carbon (δ_C 34.9), 하나의 anomeric carbon (δ_C 98.7), 일곱 개의 oxygenated carbon (δ_C 76.6, 74.9, 74.8, 73.7, 71.2, 67.6, 60.2) 을 확인할 수 있었다. 1H - 1H COSY 에서 H-3/H-4, H-4/H-5 의 correlation 그리고 HMBC 에서 H-4/C-2, H-5/C-2, H-7'''/C-2'' 과 C-8'', H-7'''/C-2'''과 C-8'''

의 correlation 으로 두 개의 4-hydroxyphenylacetyl 기와 γ -butyrolactone 부분구조를 동정하였다 (Fig. 2). ^{13}C NMR spectrum의 δ_{C} 98.7, 76.6, 74.9, 71.2, 67.6, 60.2 signal과 anomeric proton의 coupling constant ($J = 8.1$ Hz) 그리고 LC 분석을 통하여 D-glucose의 존재를 확인할 수 있다 (Tanaka et al., 2007). HMBC correlation (H-1'/C-4, H-2'/C-8'', H-3'/C-8'')을 통하여 부분구조들을 연결할 수 있다. C-4 위치의 절대구조는 Mosher's method를 통하여 구하였다. 화합물 **1** 을 β -glucosidase를 통하여 분해하였고, butyrolactone과 (R), (S)-MTPA-Cl을 반응시켜 (S)-, (R)-MTPA esters를 얻는다. $\Delta\delta_{\text{H}}^{\text{SR}}$ 값을 통하여 C-4를 R형으로 동정하였고, 이를 토대로 화합물 **1** 을 4R-O-[2,3-di-O-(4-hydroxyphenylacetyl)- β -D-glucopyranosyl]- γ -butyrolactone으로 동정하였고, taraxiroside A로 명명하였다.

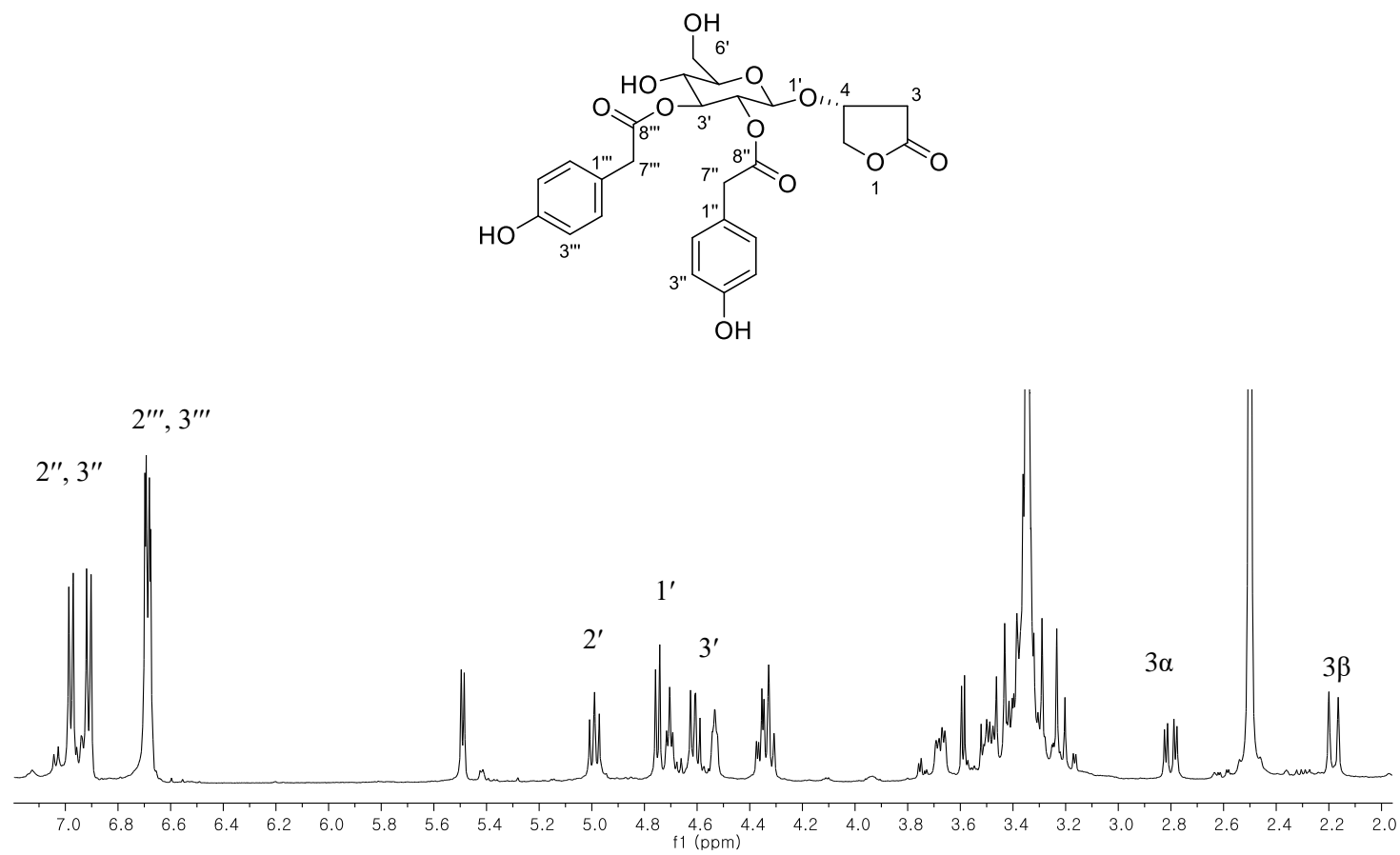


Fig. 4. ^1H -NMR spectrum of compound **1**

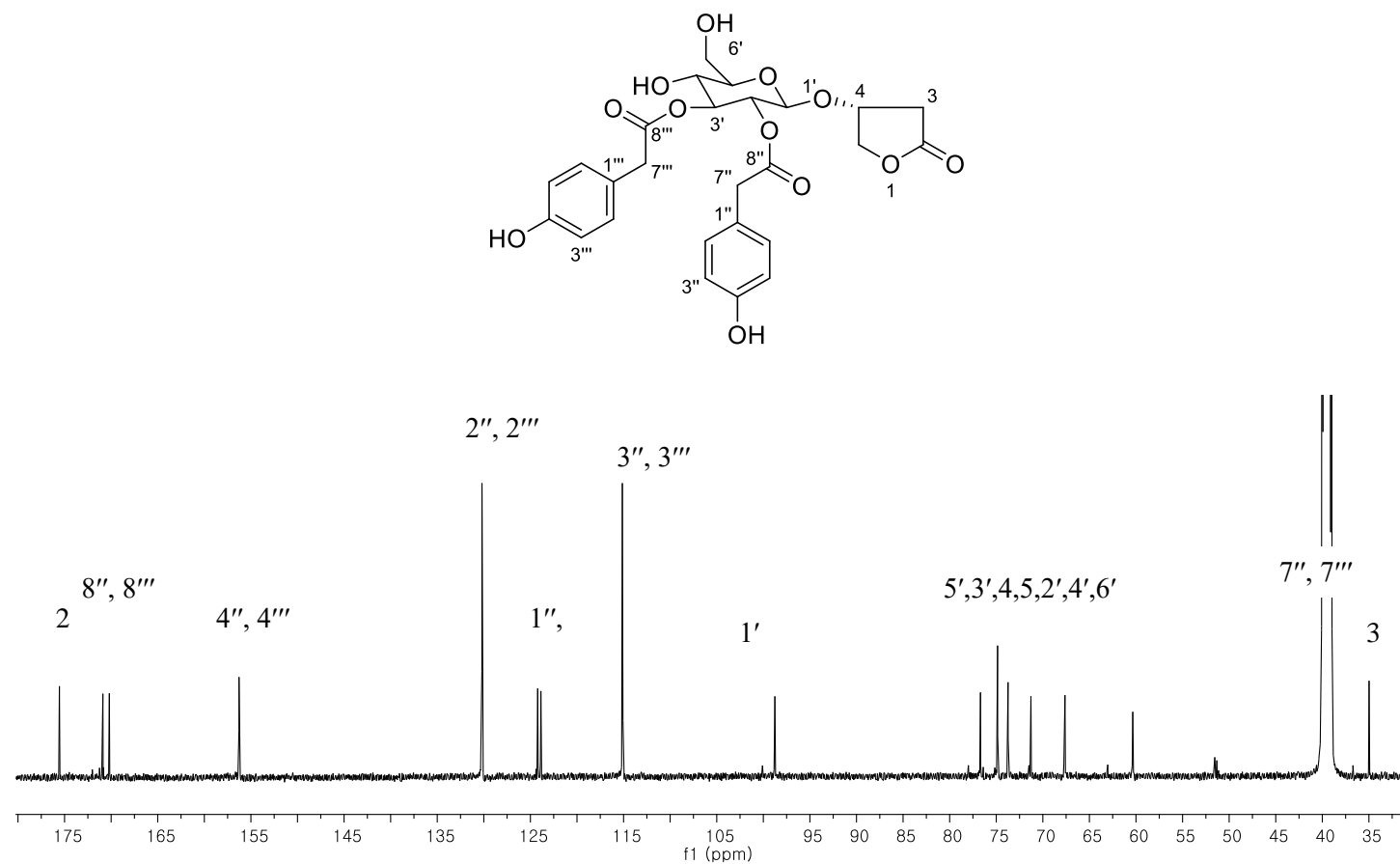


Fig. 5. ^{13}C -NMR spectrum of compound **1**

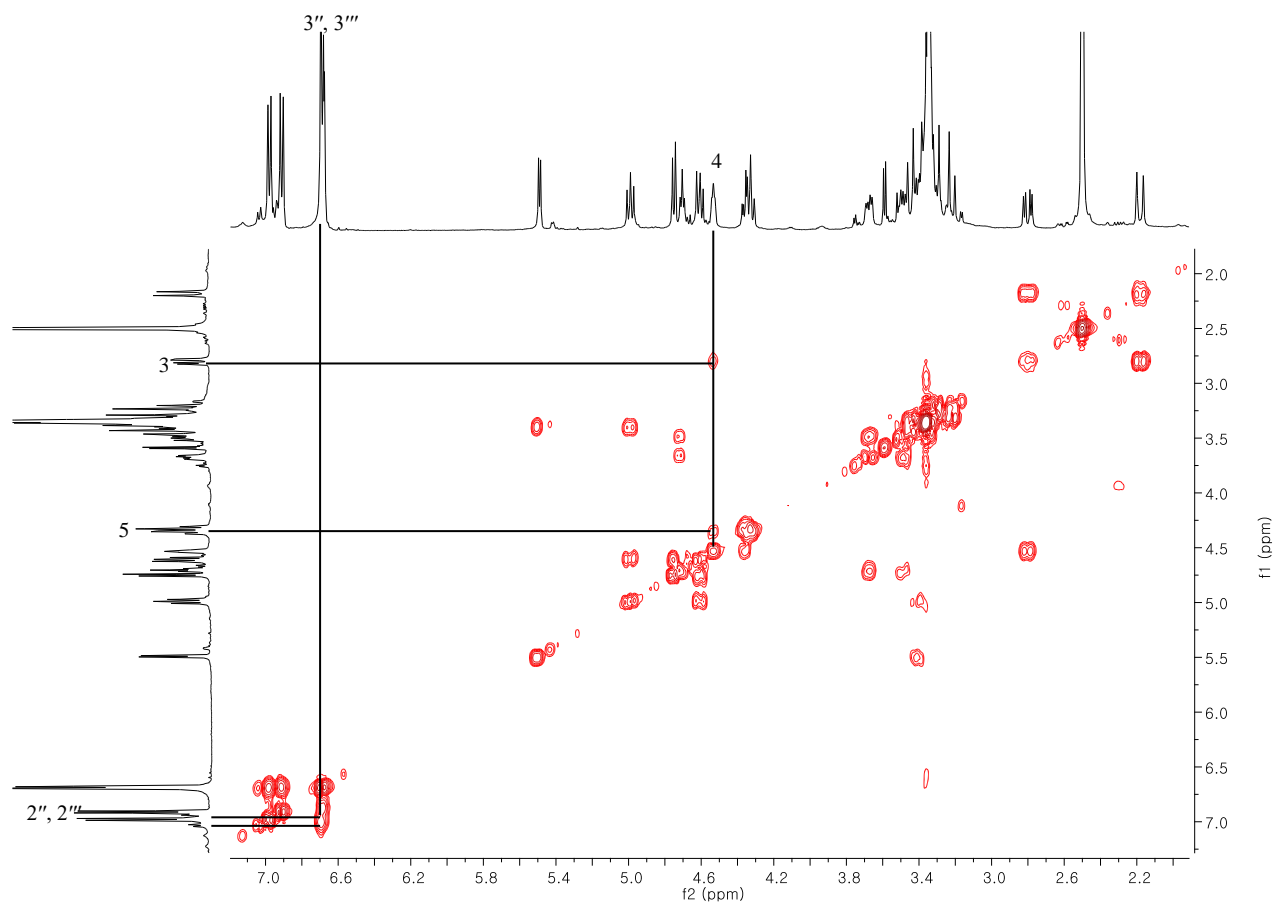


Fig. 6. ^1H - ^1H COSY spectrum of compound **1**

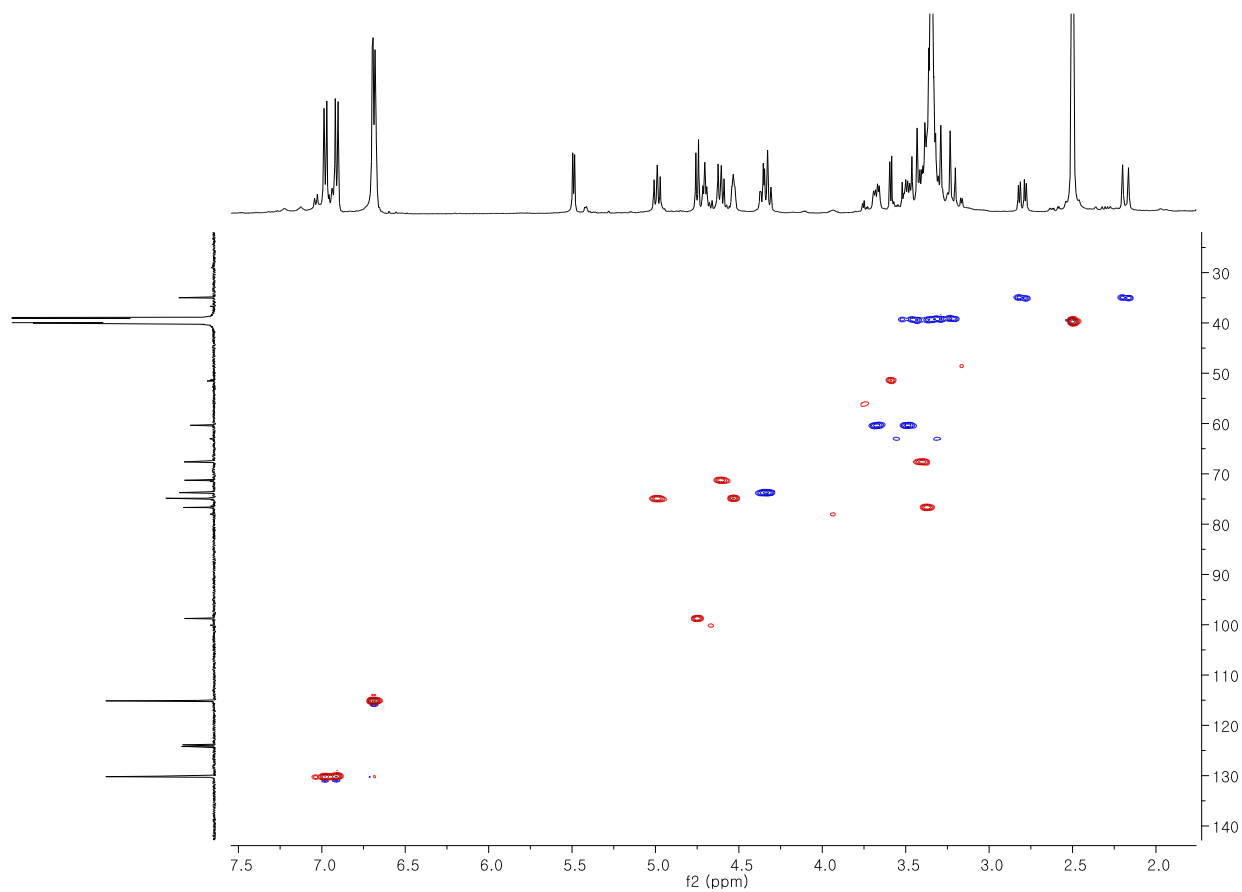


Fig. 7. HSQC spectrum of compound **1**

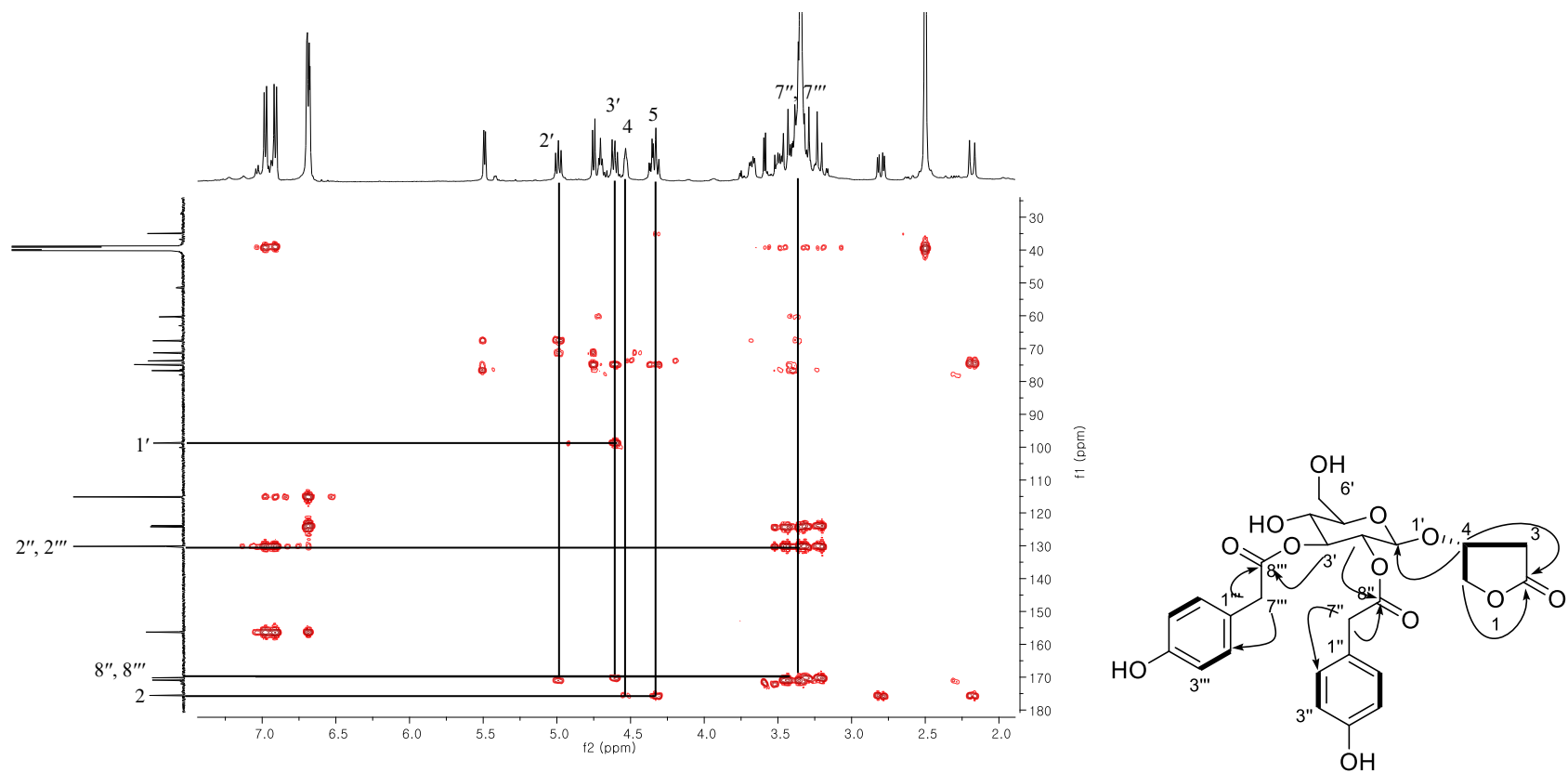


Fig. 8. HMBC spectrum of compound 1

1.2 화합물 2의 구조

Taraxiroside B (2)는 무색무정형 화합물이며 분자량 m/z 561.1602 $[M+HCOO]^-$ (calcd. for $C_{27}H_{29}O_{13}$, 561.1608)을 통해 분자식 ($C_{26}H_{28}O_{11}$)을 동정하였다. 화합물 2의 1H , ^{13}C NMR spectra는 화합물 1의 spectra와 거의 유사하나 당 3번 위치의 functional group이 phenylacetyl기로 대체되어 있다. 1H NMR spectrum에서 한 개의 1, 4-치환체 [δ_H 6.97 (2H, d, $J = 8.6$ Hz), 6.72 (2H, d, $J = 8.6$ Hz)], 한 개의 phenyl기 [δ_H 7.30 (2H, t, $J = 7.1$ Hz), 7.26 (1H, d, $J = 7.2$ Hz), 7.22 (2H, d, $J = 6.8$ Hz)], 하나의 anomeric proton [δ_H 4.64 (1H, d, $J = 8.0$ Hz)], 하나의 methylene group [δ_H 2.68 (1H, dd, $J = 18.0$, 6.2 Hz), 2.13 (1H, d, $J = 18.0$ Hz)], 두 개의 oxygenated methylene group [δ_H 4.41 (1H, t, $J = 9.4$ Hz), 4.37 (1H, dd, $J = 10.4$, 4.3 Hz), 3.86 (1H, dd, $J = 12.1$, 2.2 Hz), 3.69 (1H, dd, $J = 12.5$, 5.5 Hz)], 두 개의 carbonyl methylene proton [δ_H 3.55 (2H, d, $J = 15.5$ Hz), 3.25 (2H, d, $J = 5.1$ Hz)] 그리고 다섯 개의 oxygenated proton [δ_H 5.11 (1H, t, 9.5 Hz), 4.77 (1H, dd, $J = 9.8$, 8.1 Hz), 4.53 (1H, t, $J = 6.1$ Hz), 3.57 (1H, m), 3.41 (1H, ddd, $J = 9.8$, 5.5, 2.2 Hz)]을 확인하였다. ^{13}C NMR spectrum에서 여덟 개의 aromatic carbon (δ_C 157.8, 135.5, 131.6, 130.6, 129.7, 128.2, 126.0, 116.5), 세 개의 carbonyl carbon (δ_C 178.1, 172.9, 172.4), 두 개의 carbonyl methylene carbon (δ_C 42.0, 41.1), 하나의 methylene carbon (δ_C 36.1), 하나의 anomeric carbon (δ_C 101.2), 일곱 개의 oxygenated carbon (δ_C 78.1, 76.8, 76.6, 75.8, 73.1, 69.5, 62.2)을 확인할 수 있다. HMBC correlation H-3'/ C-8'''을 통해 phenylacetyl기가

당 3번 위치에 연결되어 있음을 알 수 있다 (Fig. 2). 화합물 1번과 같은 Mosher's method를 통하여 C-4의 절대구조를 동정하였고, *R*형으로 동정하였다. 그 결과 화합물 2를 4*R*-*O*-[2-*O*-(4-hydroxyphenylacetyl)-3-*O*-(phenylacetyl)- β -D-glucopyranosyl]- γ -butyrolactone으로 동정하였고, taraxiroside B로 명명하였다.

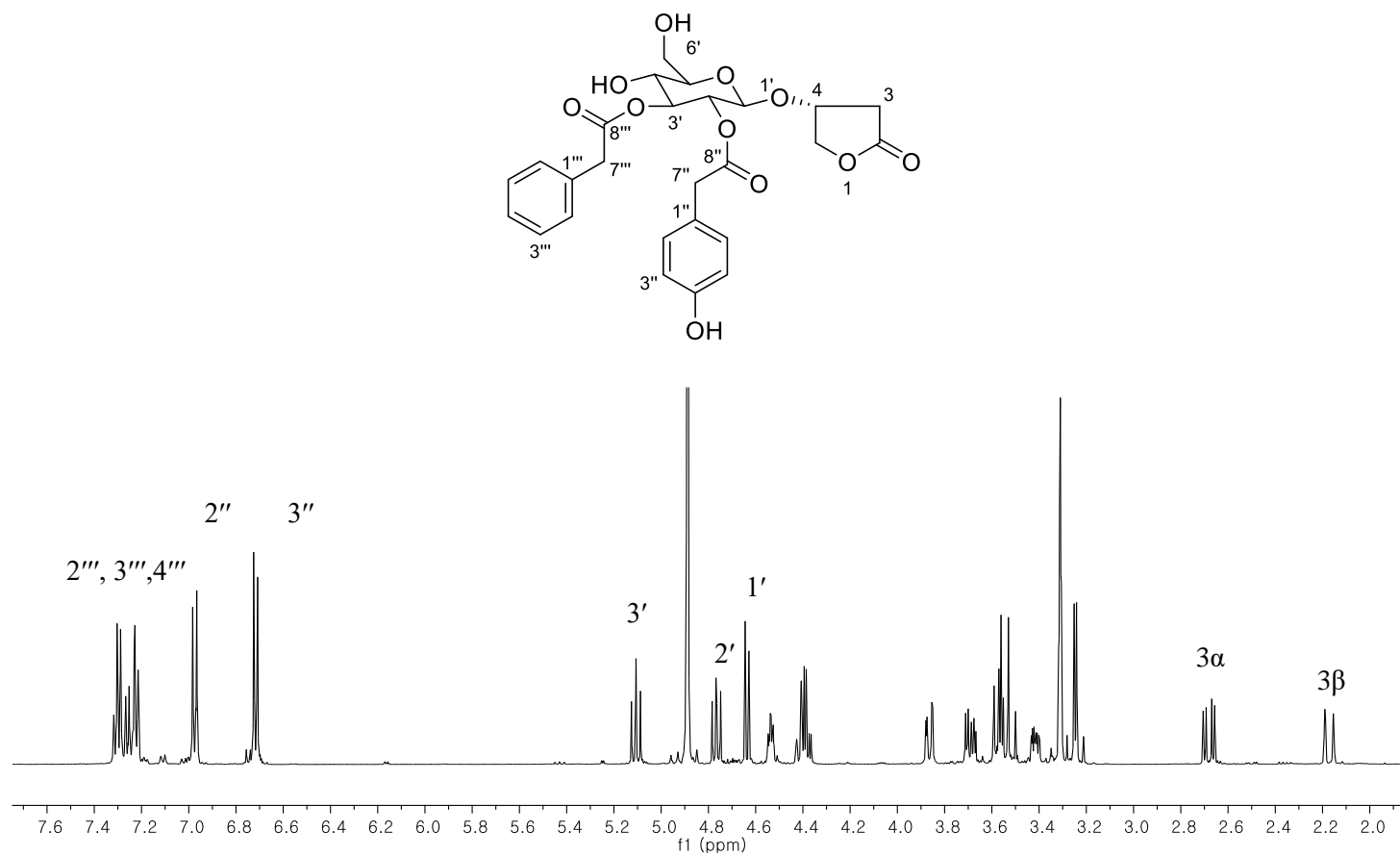


Fig. 9. ^1H -NMR spectrum of compound **2**

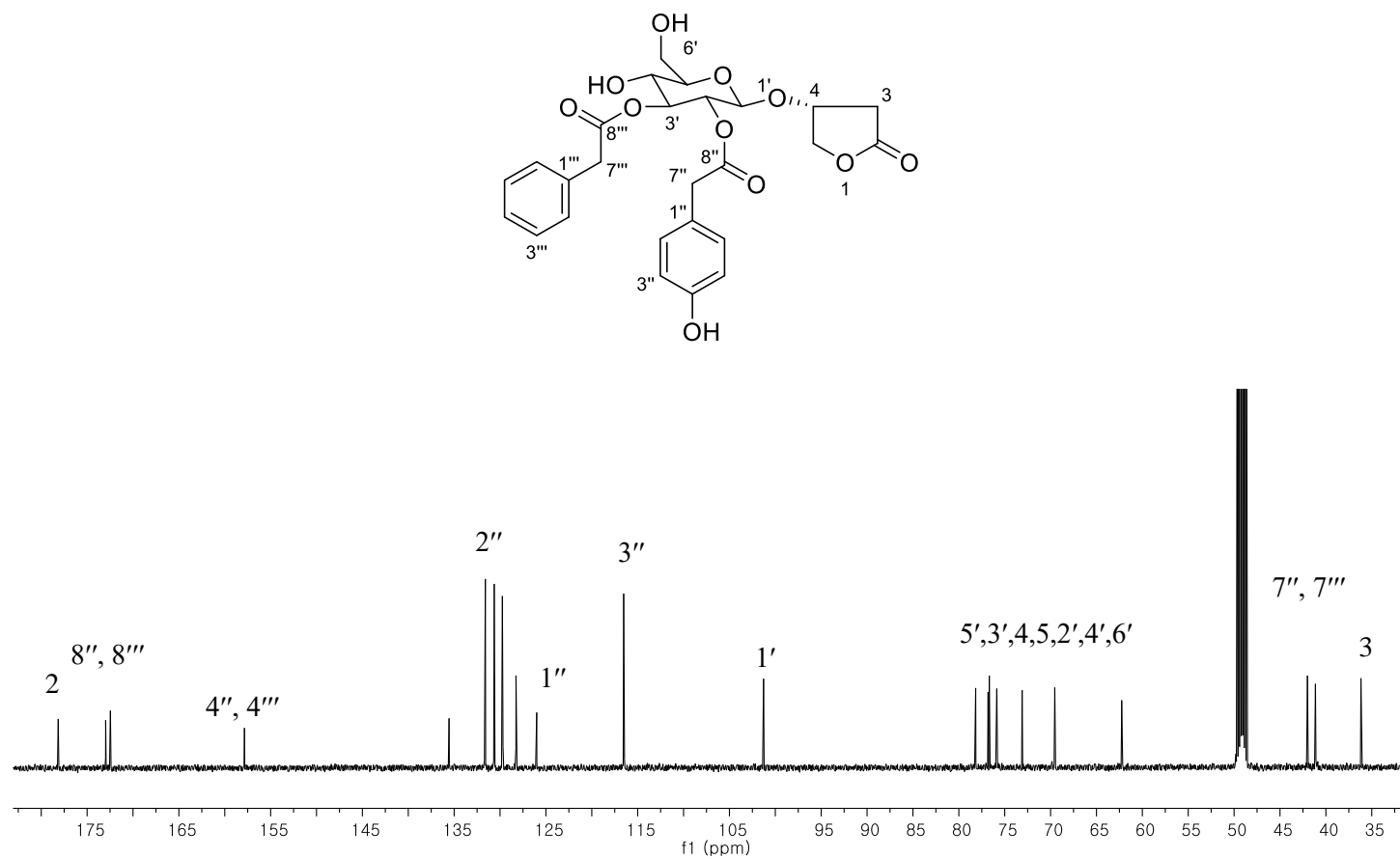


Fig. 10. ^{13}C -NMR spectrum of compound 2

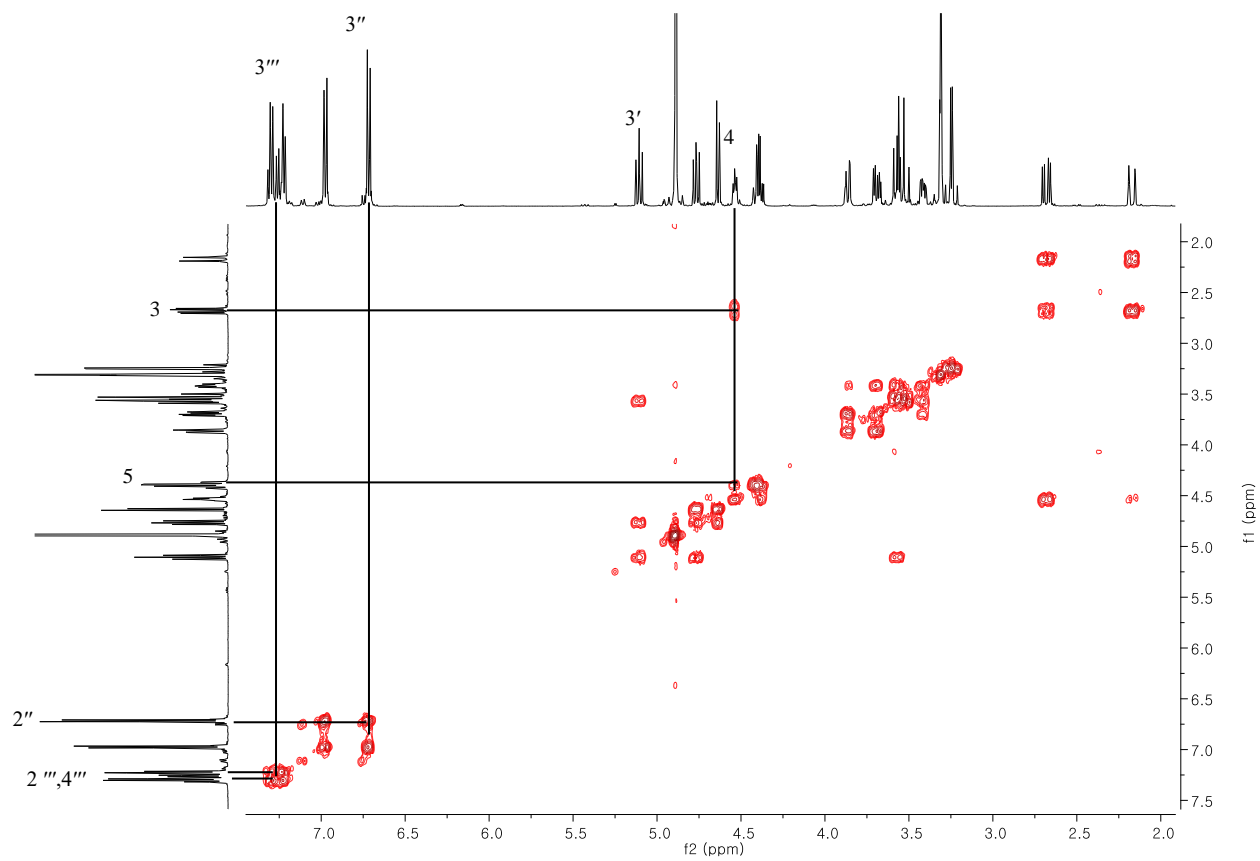


Fig. 11. ^1H - ^1H COSY spectrum of compound **2**

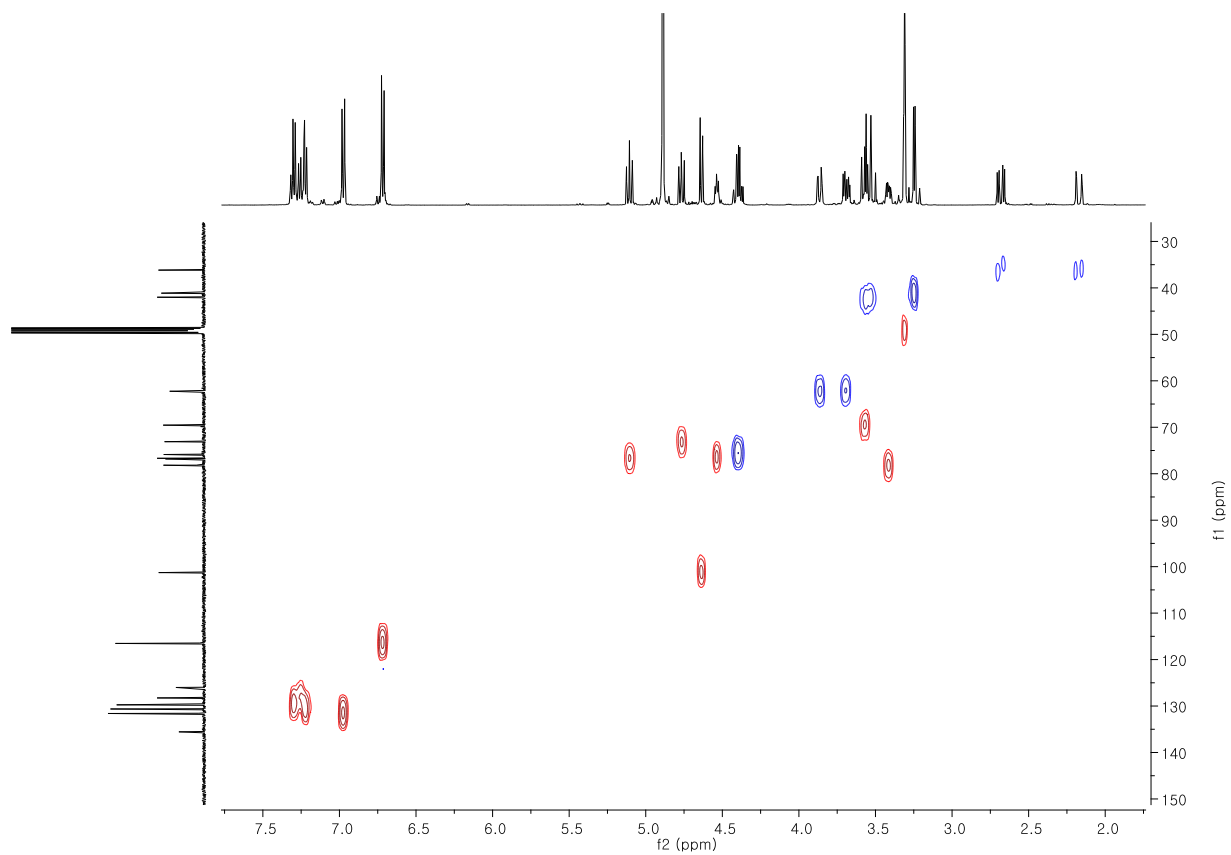


Fig. 12. HSQC spectrum of compound **2**

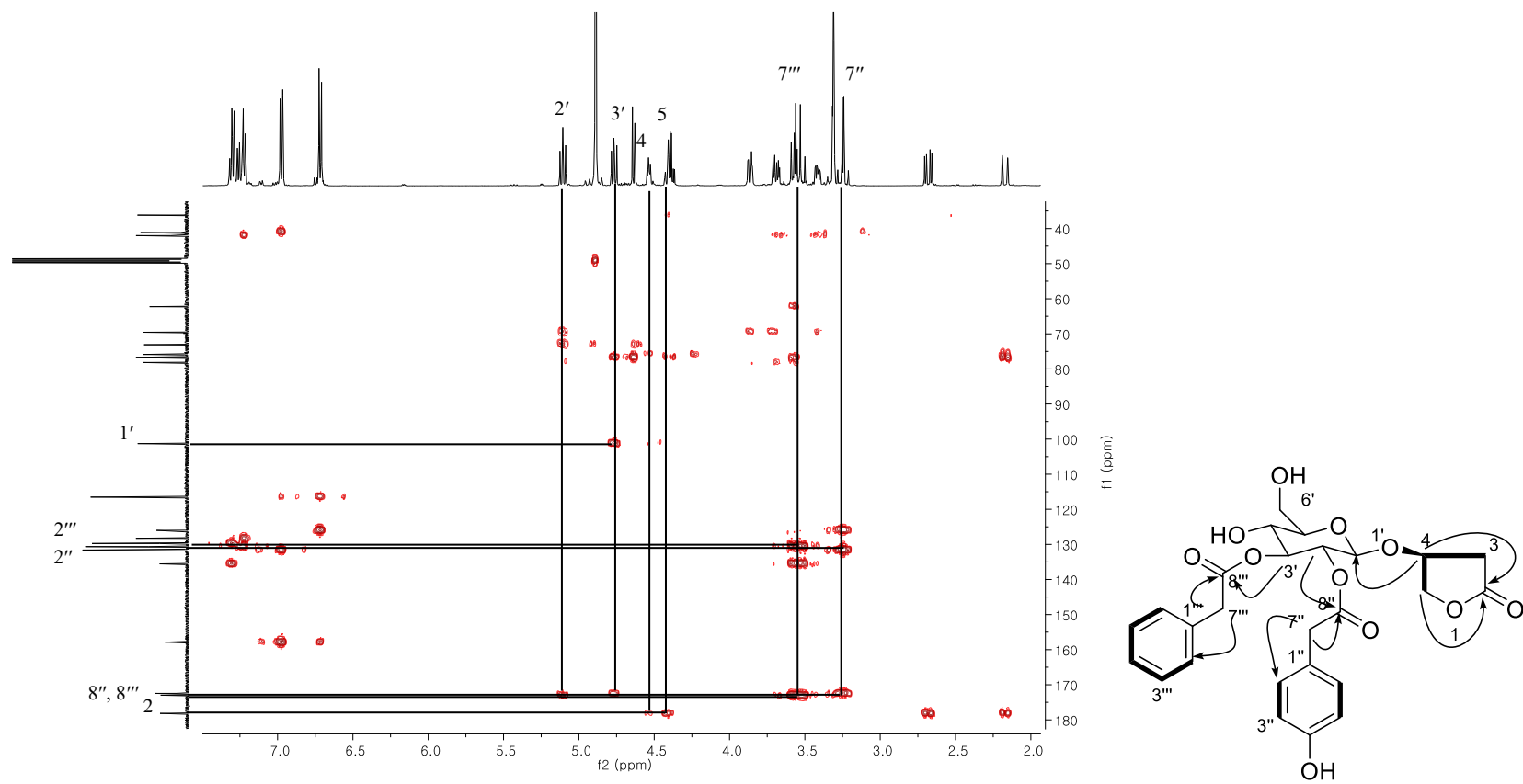


Fig. 13. HMBC spectrum of compound **2**

1.3 화합물 3의 구조

Taraxiroside C (**3**) 는 무색무정형 화합물이며 HRMS 값 [m/z 421.1125 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{18}H_{22}O_{10}Na$, 421.1111)]을 통해 분자식 $C_{18}H_{22}O_{10}$ 을 구하였다. 1H , ^{13}C NMR spectra에서 당 3번위치의 functional group이 없어진 것을 제외하고 화합물 **1**과 유사한 패턴을 갖는다. 1H , ^{13}C NMR spectra에서 통해 두 개의 carbonyl기 (δ_C 178.2, 173.1), 네 개의 aromatic carbon [δ_C/δ_H 157.7, 131.6/7.11 (2H, d, $J = 8.2$ Hz), 126.4, 116.4/6.75 (2H, d, $J = 8.2$ Hz)], 하나의 anomeric signal [δ_C/δ_H 101.6/4.52 (1H, d, $J = 8.2$ Hz)], 일곱 개의 oxygenated group [δ_C/δ_H 78.3/3.31 (1H, m), 76.5/4.50 (1H, t, $J = 6.0$ Hz), 76.0/3.54 (1H, t, $J = 9.2$ Hz), 75.9/4.41 (1H, t, $J = 10.0$ Hz), 4.37 (1H, d, $J = 10.0$ Hz), 75.2/4.69 (1H, t, $J = 8.6$ Hz), 71.5/4.35 (1H, t, $J = 9.2$ Hz), 62.6/3.87 (1H, d, $J = 12.1$ Hz), 3.67 (1H, dd, $J = 12.1, 5.4$ Hz)], 두 개의 methylene group [δ_C/δ_H 41.4/3.57 (2H, d, $J = 9.7$ Hz), 36.1/2.65 (1H, dd, $J = 18.0, 6.0$ Hz), 2.13 (1H, d, $J = 18.0$ Hz)]을 확인할 수 있다. Mosher's method를 통해 C-4를 R형으로 동정하였고, 화합물 **3**을 4*R*-*O*-[2-*O*-(4-hydroxyphenylacetyl)- β -D-glucopyranosyl]- γ -butyrolactone로 동정하였으며, taraxiroside C로 명명하였다.

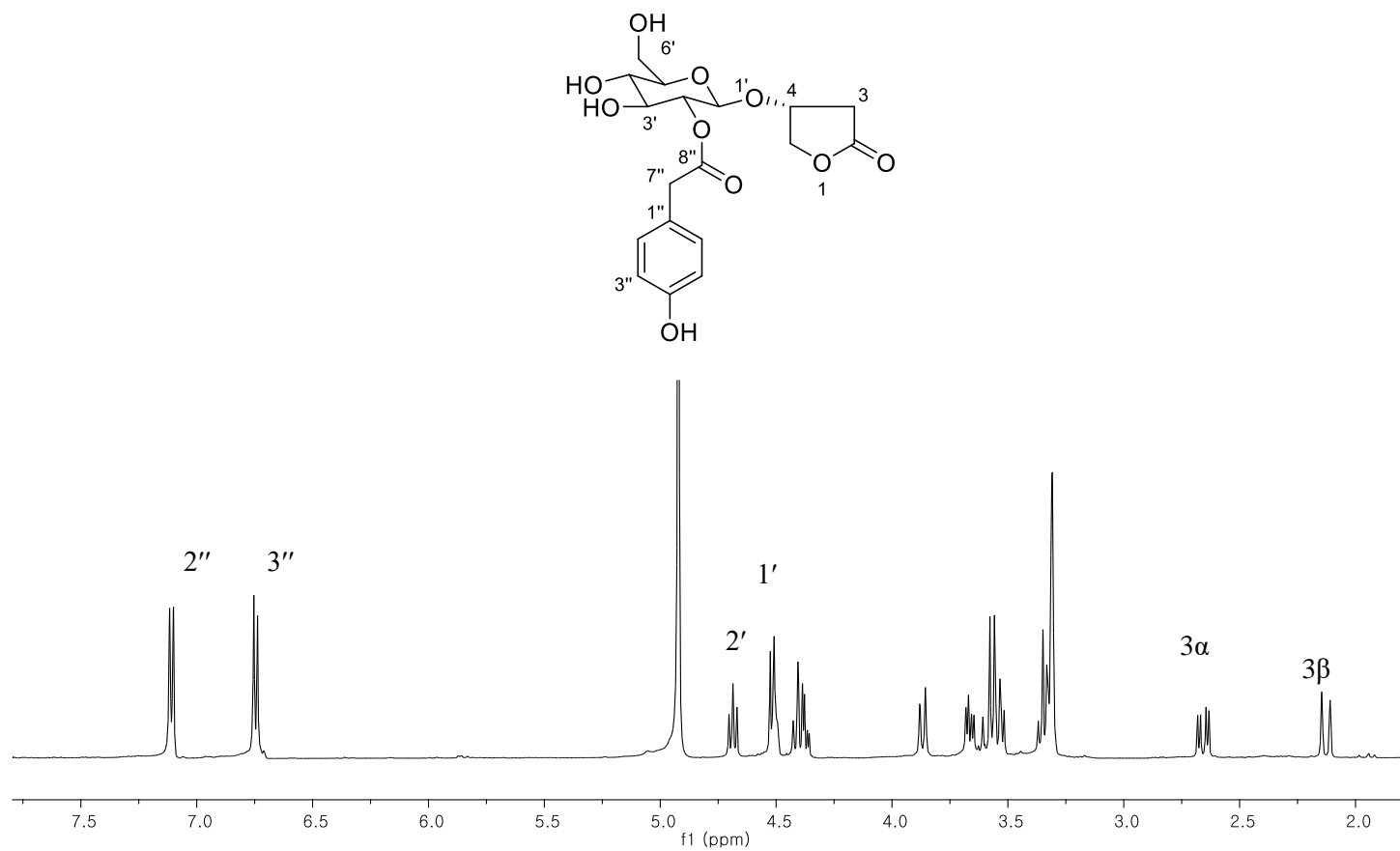


Fig. 14. ¹H-NMR spectrum of compound **3**

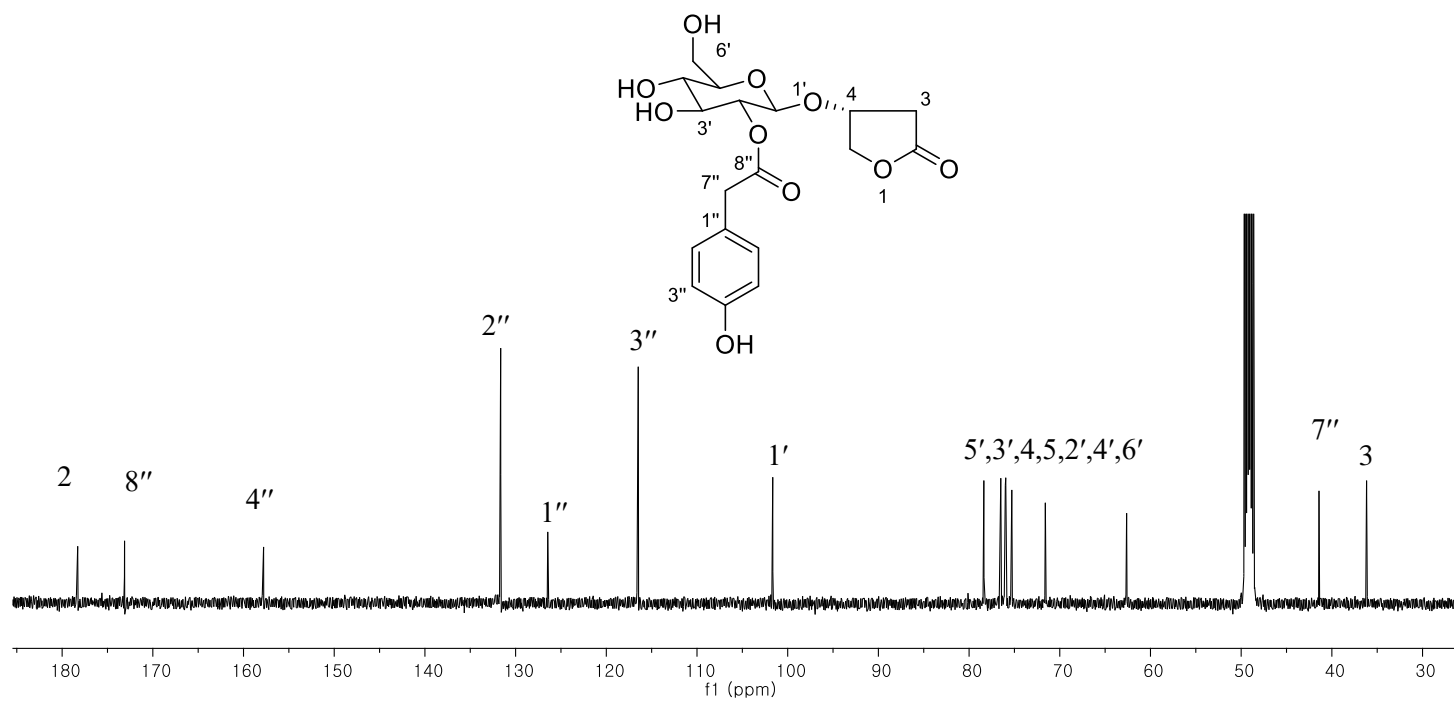


Fig. 15. ^{13}C -NMR spectrum of compound **3**

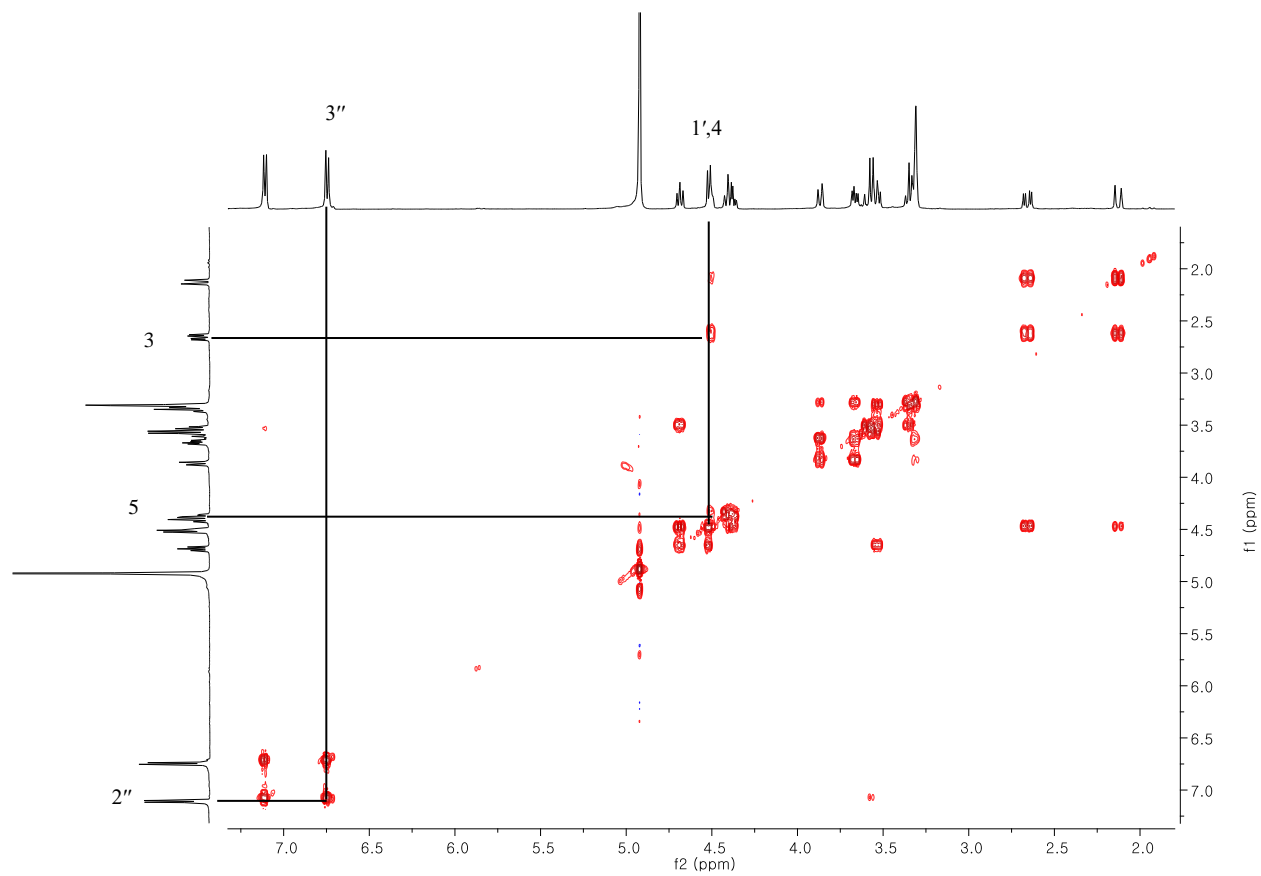


Fig. 16. ^1H - ^1H COSY spectrum of compound **3**

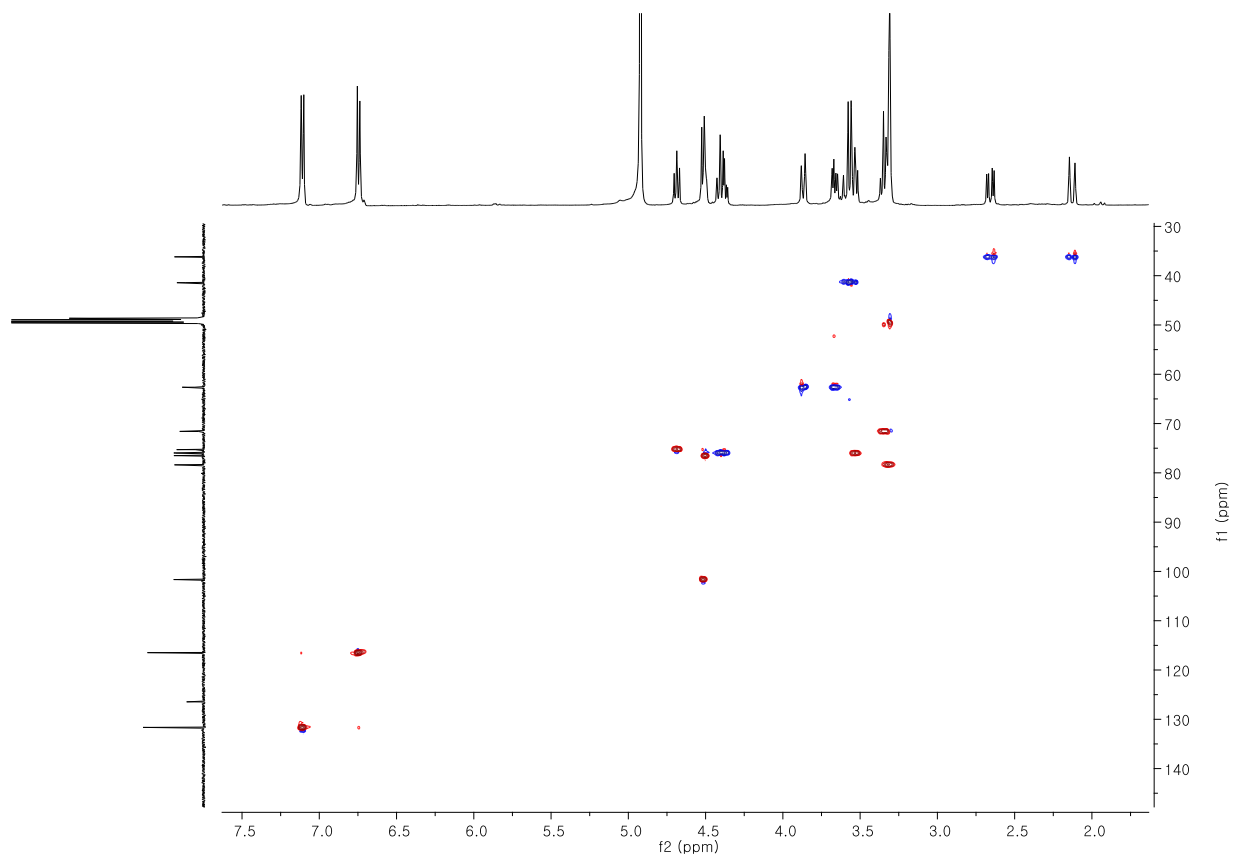


Fig. 17. HSQC spectrum of compound **3**

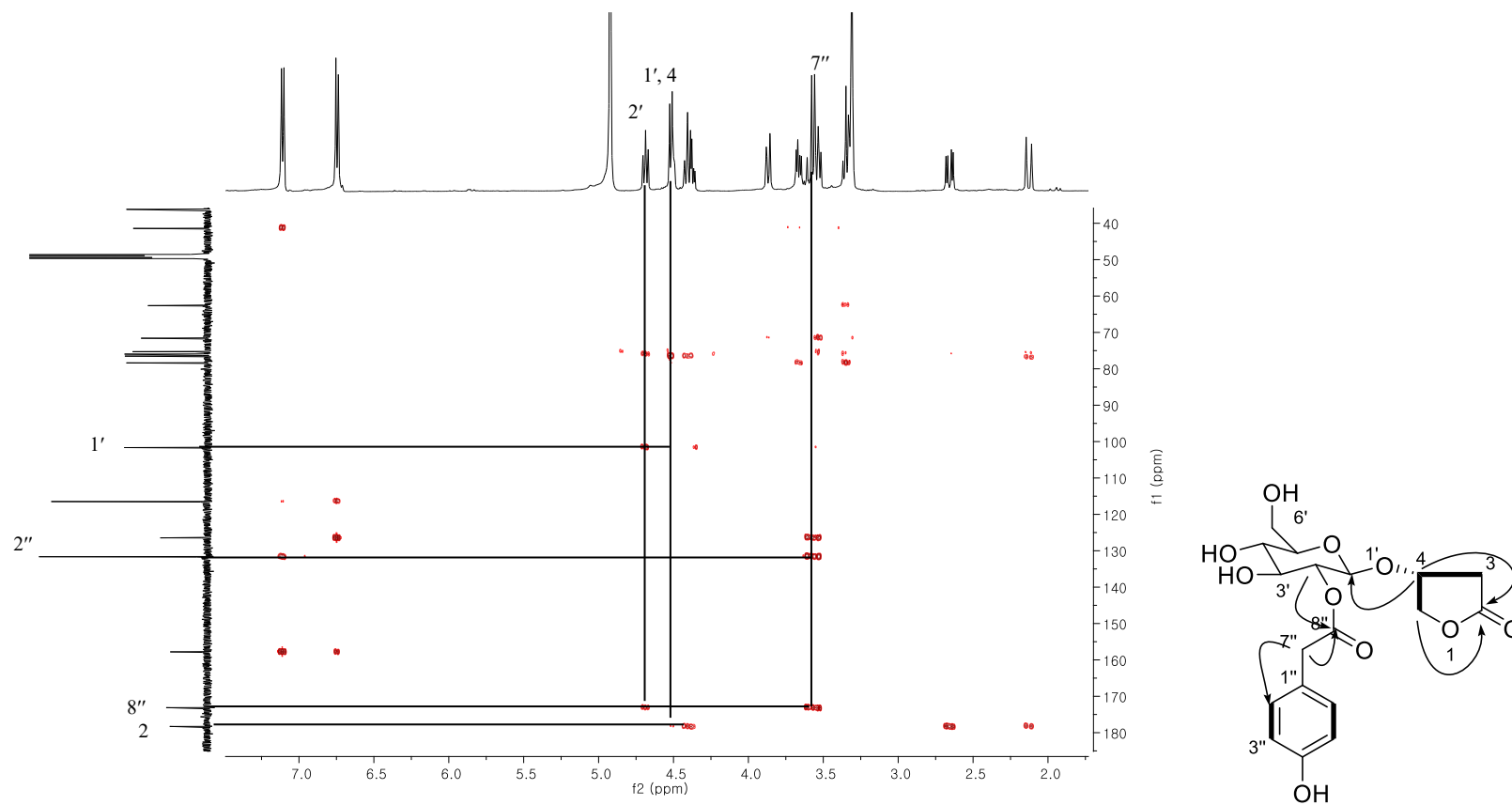


Fig. 18. HMBC spectrum of compound **3**

1.4 화합물 4의 구조

taraxiroside E (**4**)는 무색무정형 화합물로서 분자량 m/z 561.1598 $[M-H]^-$ (calcd. for $C_{27}H_{29}O_{13}$, 561.1608)을 통해 분자식 $C_{27}H_{30}O_{13}$ 을 구하였다. 1H , ^{13}C NMR 그리고 HSQC spectra를 통해 네 개의 ketone기 (δ_C 185.4, 173.2, 172.9, 164.7), 여덟 개의 aromatic carbon [δ_C/δ_H 166.1, 135.2, 134.1/7.77 (2H, d, J = 8.8 Hz), 130.7/7.24 (2H, m), 129.6/7.22 (2H, m), 125.1, 128.1/7.17 (1H, t, J = 7.6 Hz), 117.1/6.85 (2H, d, J = 8.8 Hz)], 하나의 anomeric signal [δ_C/δ_H 101.7/4.87 (1H, d, J = 8.0 Hz)], 일곱 개의 oxygenated group [δ_C/δ_H 79.1/4.16 (1H, dd, J = 8.1, 4.6 Hz), 78.0/4.16 (1H, m), 76.7/5.24 (1H, dd, J = 9.4, 9.6 Hz), 74.5/5.02 (1H, dd, J = 9.8, 8.0 Hz), 69.8/3.66 (1H, m), 65.4/3.65 (2H, m), 62.1/3.90 (1H, dd, J = 12.0, 2.2 Hz), 3.74 (1H, dd, J = 12.1, 5.2 Hz)], 한 개의 methoxyl기 [δ_C/δ_H 52.2/3.42 (3H, s)], 두 개의 methylene groups [δ_C/δ_H 41.9/3.71 (2H, s), 37.6/2.58 (1H, d, J = 4.6 Hz), 2.55 (1H, d, J = 8.1 Hz)]의 존재를 확인하였다. ^{13}C NMR signal δ_C 101.7, 78.0, 76.7, 74.5, 69.8, 62.1 과 anomeric proton의 J value를 통하여 β -glucose moiety를 동정하였고, 1H - 1H COSY (H-2/H-3, H-3/H-4), HMBC correlation (-OCH₃/C-1, H-2/C-1, H-2''/C-7'' , H-2'''/C-7''')을 통하여 부분구조 methyl-butanoate와 4-hydroxyphenylglyoxyl 기 및 phenylacetyl 기의 존재를 확인하였다. 또한 HMBC correlation (H-1'/C-3, H-2'/C-8, H-3'/C-8''')을 통하여 이들을 연결하였다. 절대구조를 밝히기 위하여 화합물 **4**를 산 가수분해를 한 뒤 Mosher's method를 실시하였고, C-3을 R형으로 동정하였다. 그 결과, 화합물 **4**를 methyl-3*R*-O-[2-O-(4-

hydroxyphenylglyoxyl)-3-*O*-(phenylacetyl)- β -D-glucopyranosyl]-butanoate 로

동정하였으며, taraxiroside D로 명명하였다.

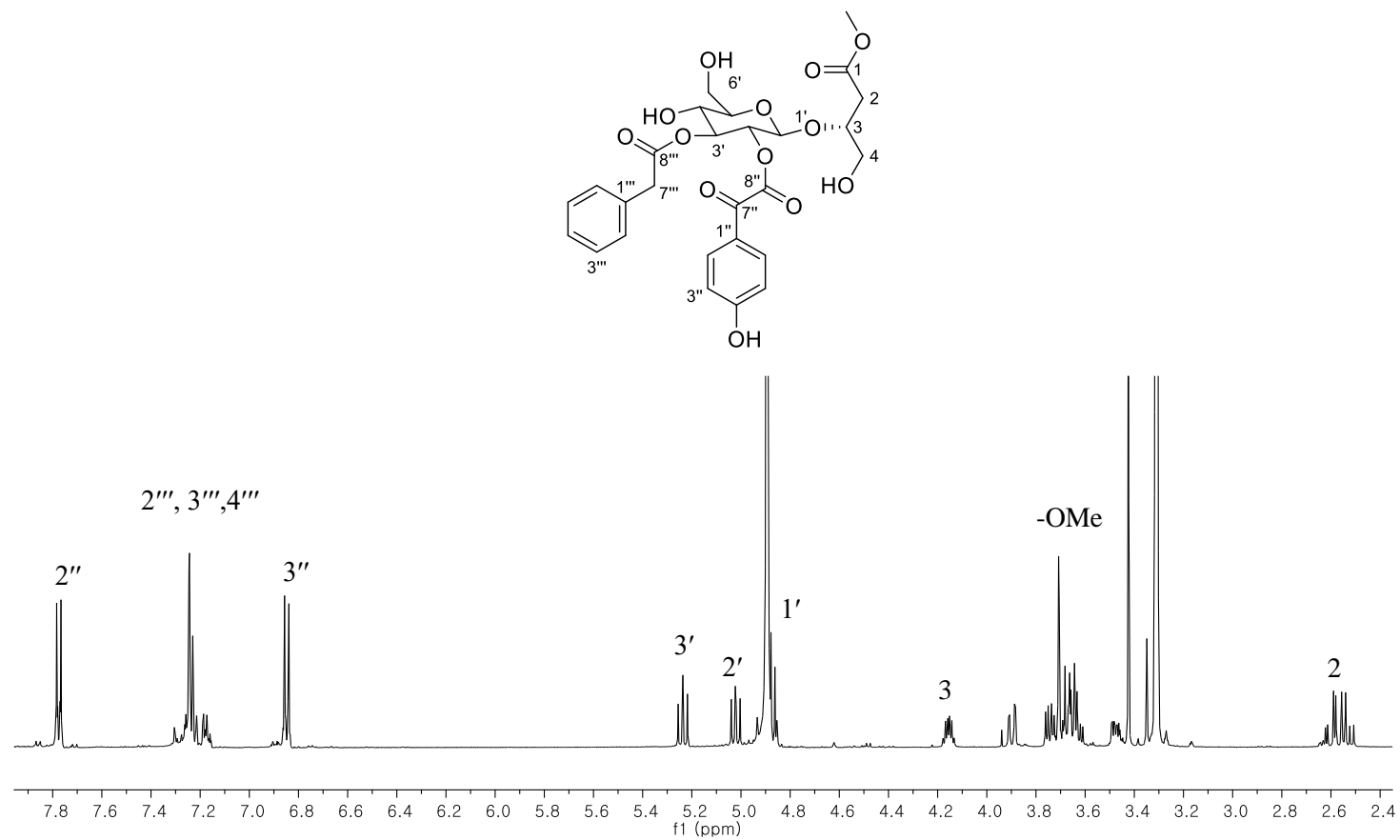


Fig. 19. ^1H -NMR spectrum of compound 4

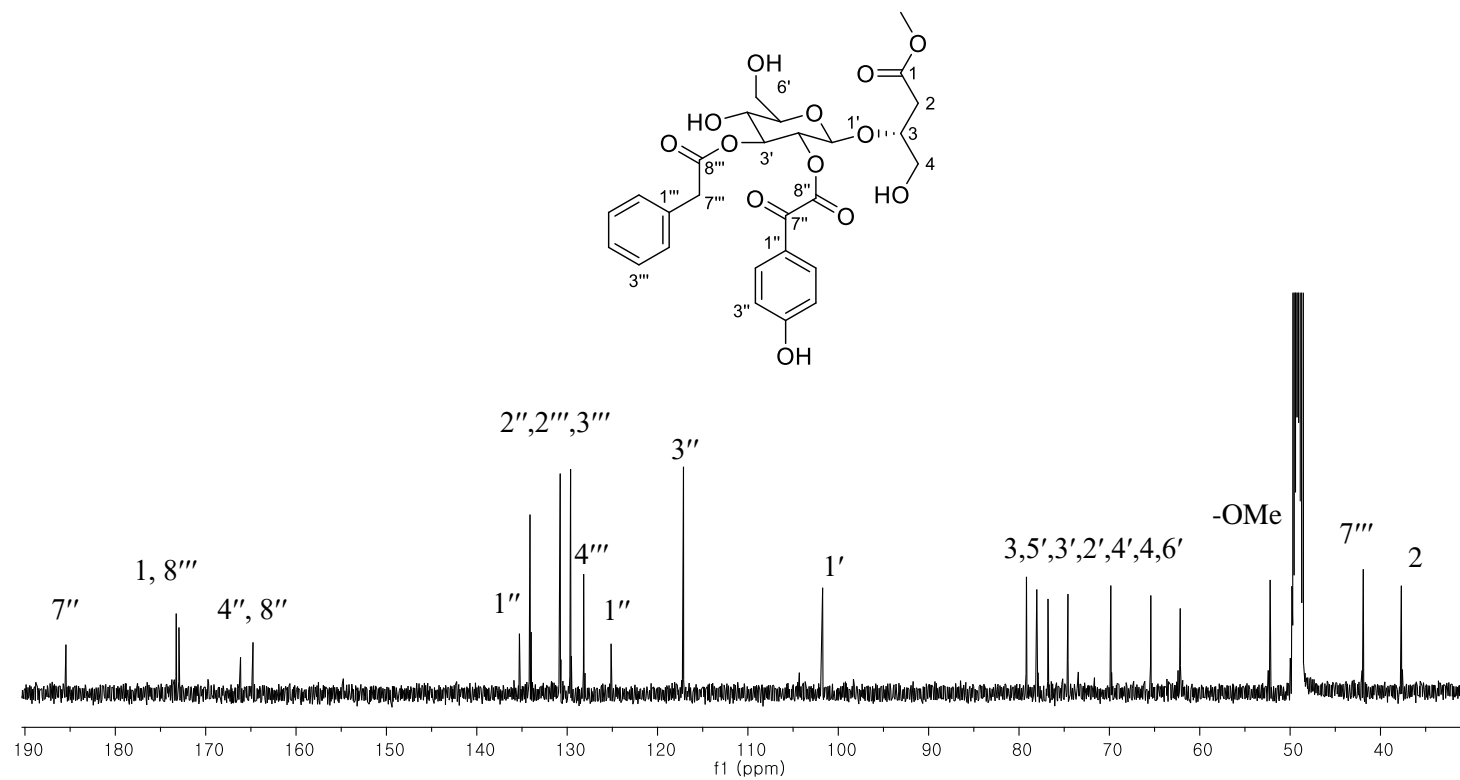


Fig. 20. ^{13}C -NMR spectrum of compound 4

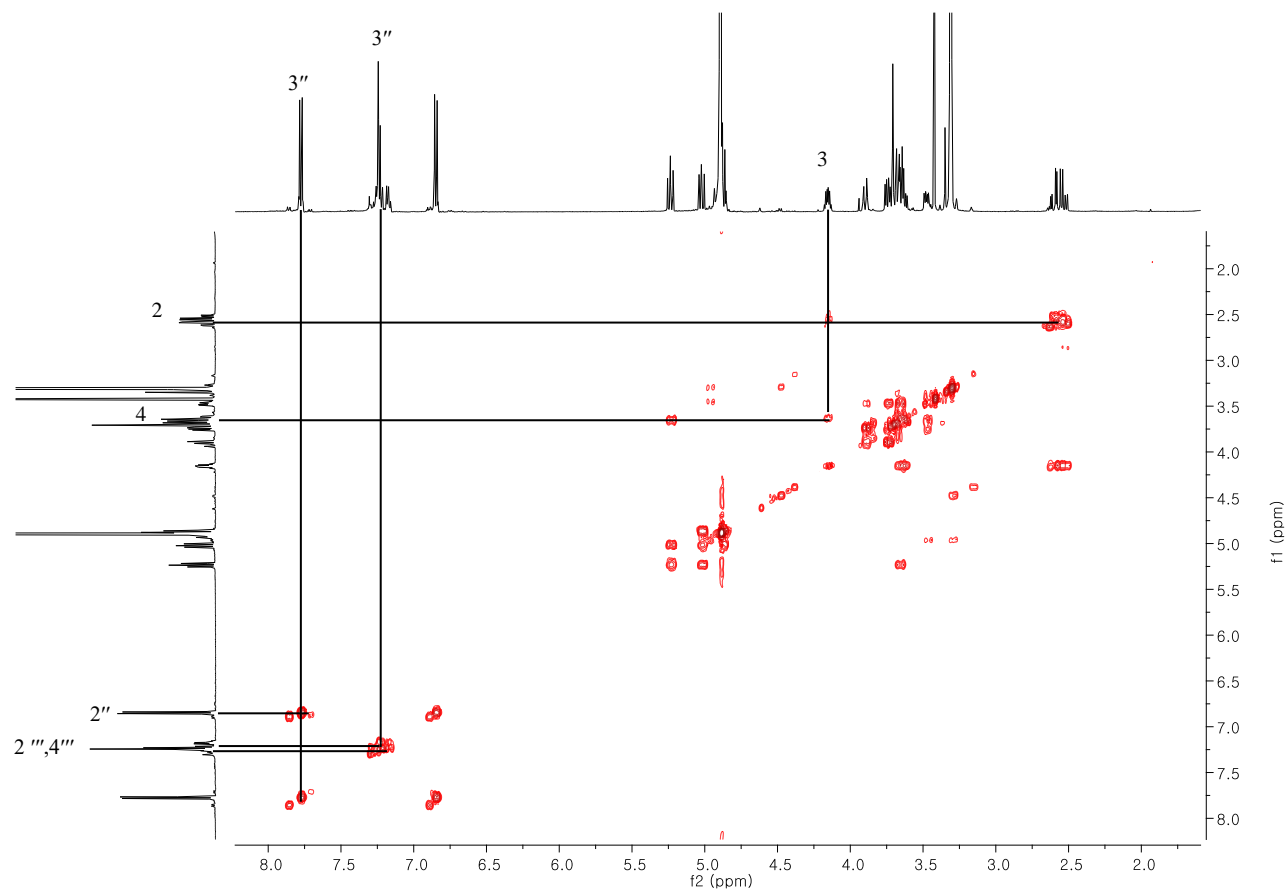


Fig. 21. ^1H - ^1H COSY spectrum of compound **4**

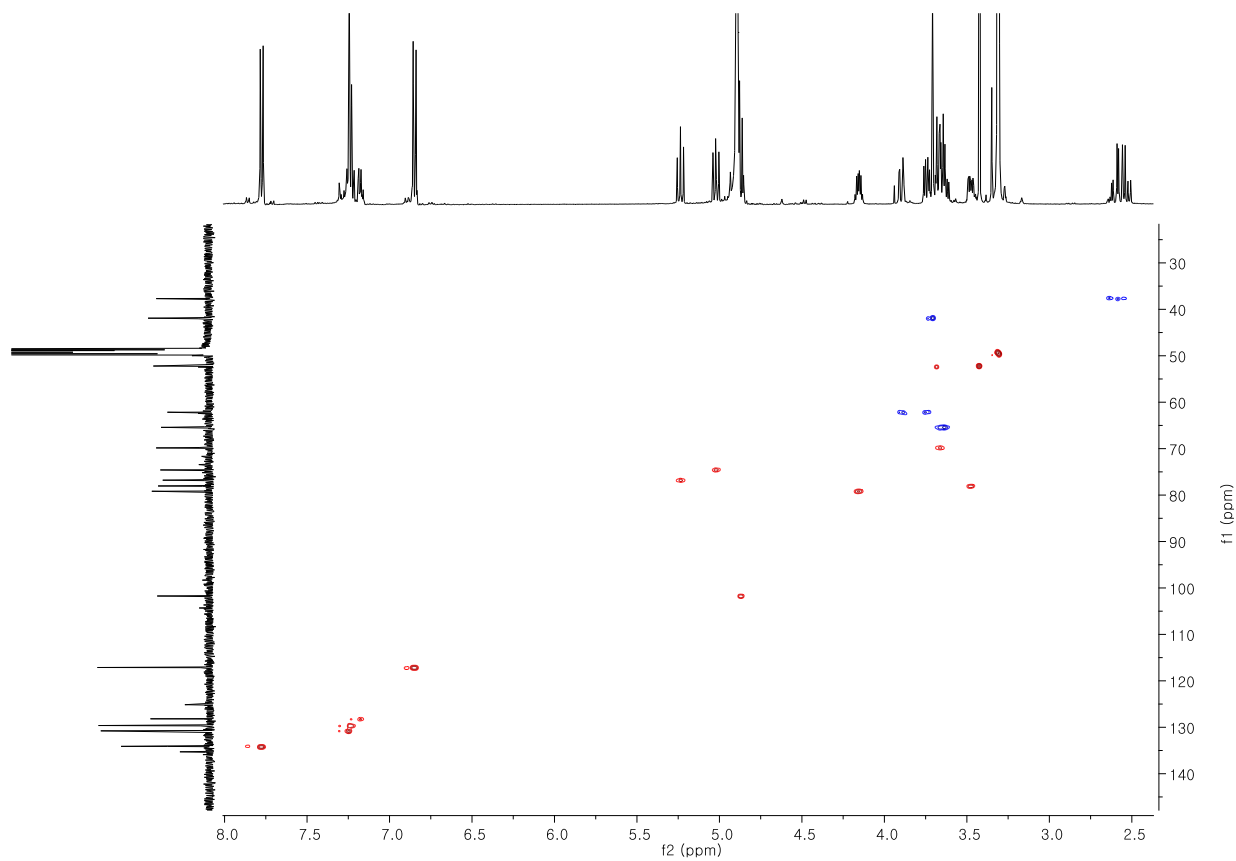


Fig. 22. HSQC spectrum of compound **4**

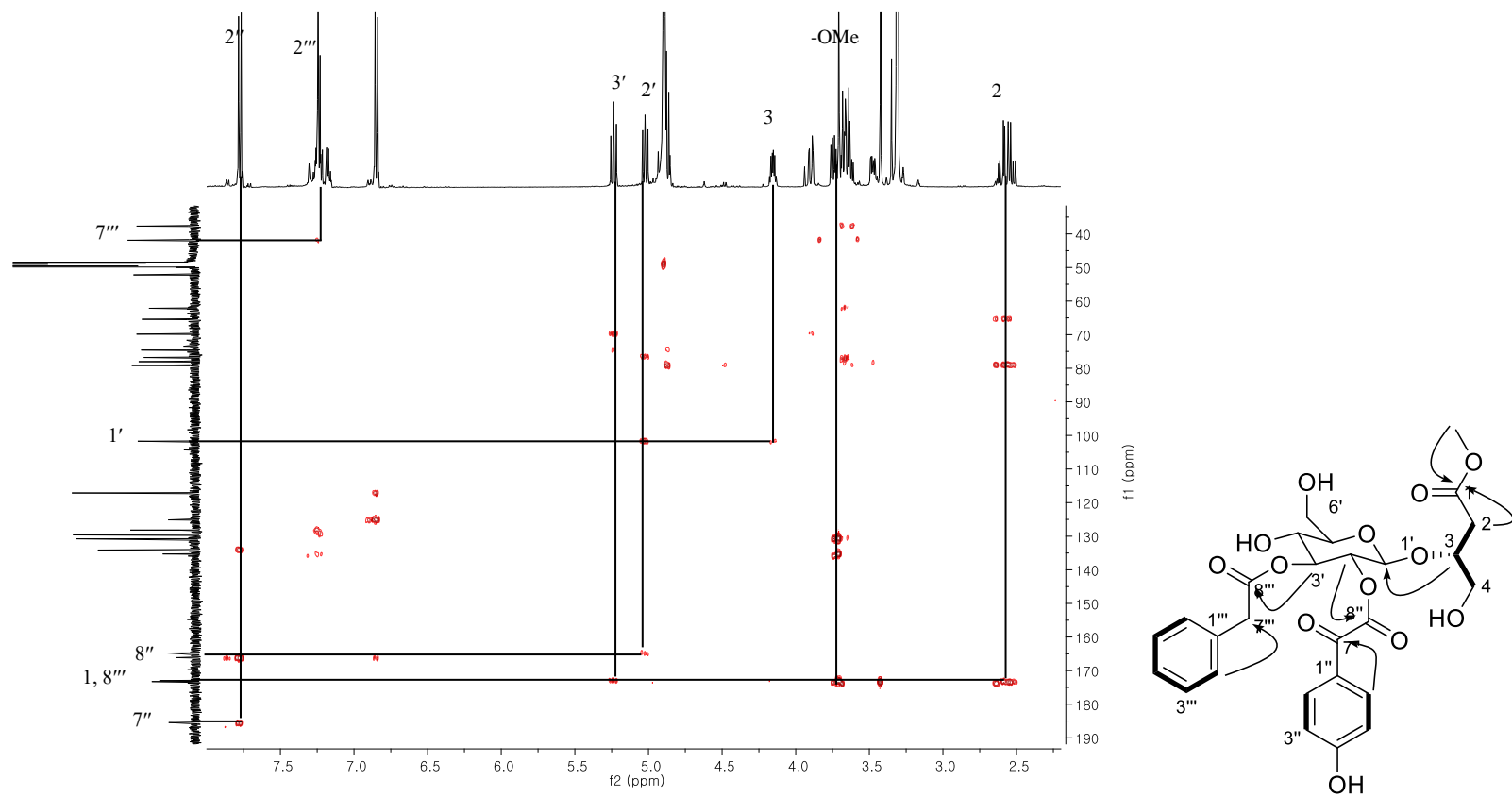


Fig. 23. HMBC spectrum of compound 4

1.5 화합물 5의 구조

화합물 5는 무색무정형 화합물로 HRESIMS 값 [m/z 593.1863 $[M+HCOO]^-$ (calcd. for $C_{28}H_{33}O_{14}$, 593.1870)]을 통해 분자식이 $C_{27}H_{32}O_{12}$ 인 화합물이다. 1H , ^{13}C NMR spectra를 통해 화합물 4와 유사한 구조를 갖고 있음을 알 수 있다. 가장 큰 변화는 C-7''의 carbonyl기가 없어짐으로써 4-hydroxyphenylacetyl기로 대체되었다는 점이다. 1H , ^{13}C NMR spectra에서 세 개의 carbonyl기 (δ_C 173.2, 172.9, 172.7), 여덟 개의 aromatic carbon [δ_C/δ_H 157.8, 135.4, 131.7/6.99 (2H, d, J = 8.8 Hz), 130.6/7.18 (2H, d, J = 8.3 Hz), 129.6/7.28 (2H, t, J = 6.3 Hz), 128.1/7.28 (1H, d, J = 7.2 Hz), 126.0, 116.4/6.70 (2H, d, J = 8.8 Hz)], 하나의 anomeric signal [δ_C/δ_H 102.1/4.69 (1H, d, J = 8.0 Hz)], 일곱 개의 oxygenated group [δ_C/δ_H 79.7/4.07 (1H, dd, J = 8.3, 4.8 Hz), 77.8/3.42 (1H, m), 77.0/5.09 (1H, t, J = 9.5 Hz), 73.3/4.75 (1H, dd, J = 9.7, 8.0 Hz), 69.6/3.56 (1H, m), 65.2/3.58 (2H, d, J = 4.8 Hz), 62.2/3.83 (1H, dd, J = 12.0, 2.3 Hz), 3.70 (1H, dd, J = 11.0, 4.1 Hz)], 한 개의 methoxyl기 [δ_C/δ_H 52.3/3.67 (3H, s)], 세 개의 methylene group [δ_C/δ_H 41.8/3.52 (1H, d, J = 14.8 Hz), 3.43 (1H, m), 41.0/3.59 (1H, d, J = 4.9 Hz), 3.32 (1H, m), 37.7/2.50 (1H, dd, J = 16.2, 4.8 Hz), 2.36 (1H, dd, J = 16.2, 8.3 Hz)]을 확인할 수 있다. HMBC correlation (H-2''/ C-7'')를 통해 4-hydroxyphenylacetyl기가 당 2번 위치에 연결되어 있는 것을 확인할 수 있다. 화합물 4와 같이 Mosher's method를 사용하였으며 C-3의 절대구조를 R형으로 동정하였다. 이것으로 화합물 5를 methyl-3*R*-O-[2-O-(4-hydroxyphenylacetyl)-3-O-(phenylacetyl)- β -D-

glucopyranosyl]-butanoate로 동정하였으며, taraxiroside E라 명명하였다.

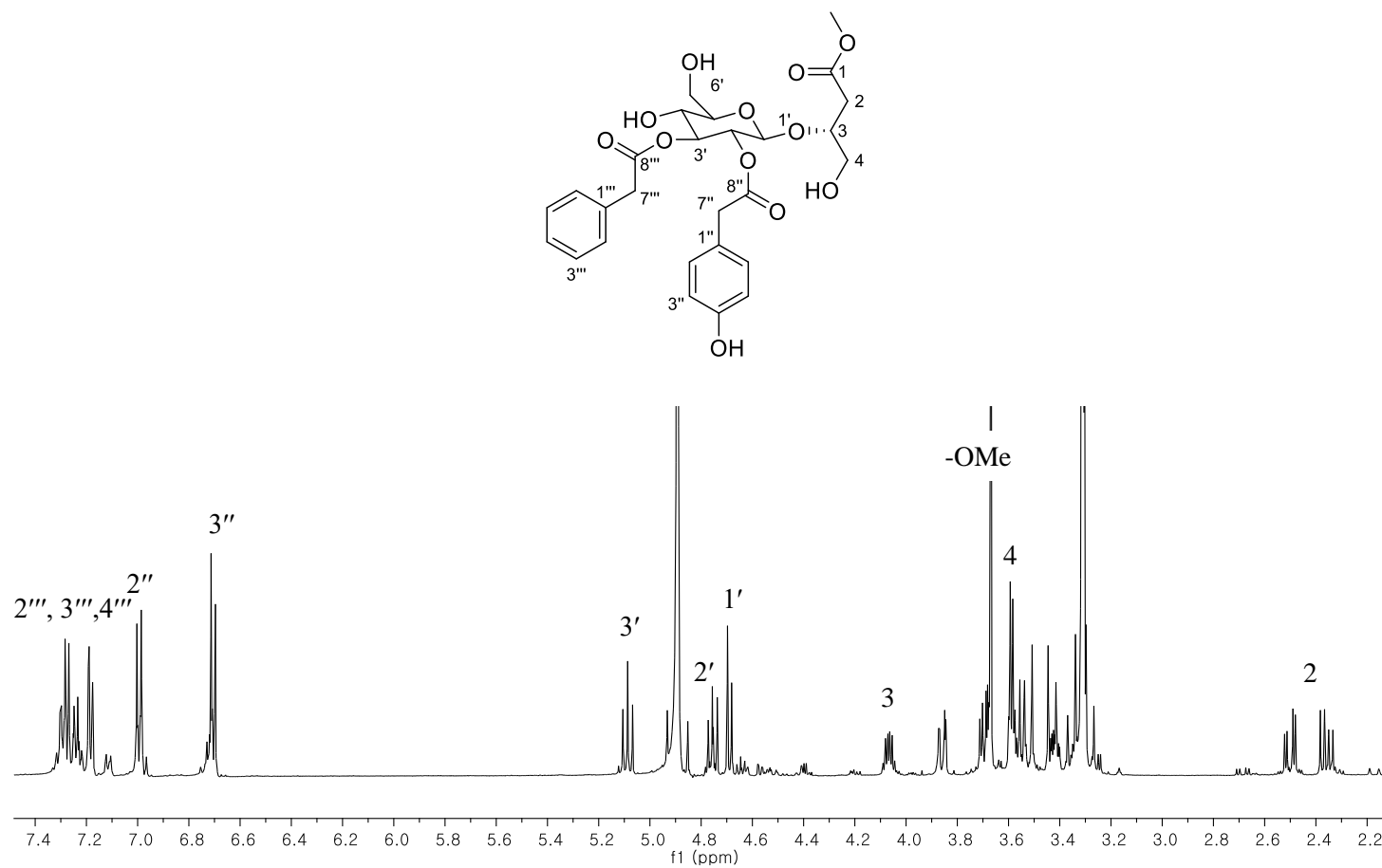


Fig. 24. ^1H -NMR spectrum of compound **5**

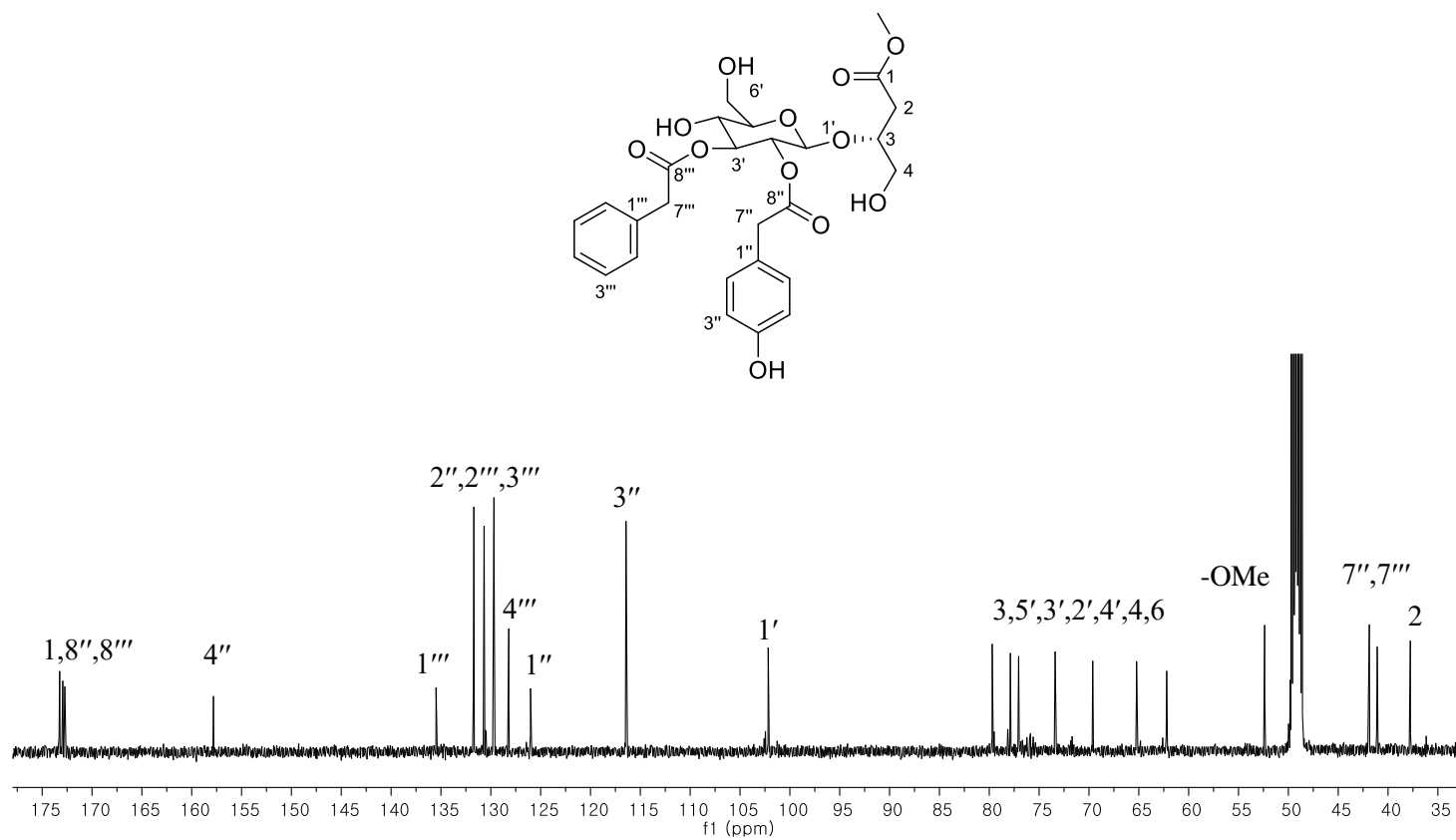


Fig. 25. ^{13}C -NMR spectrum of compound 5

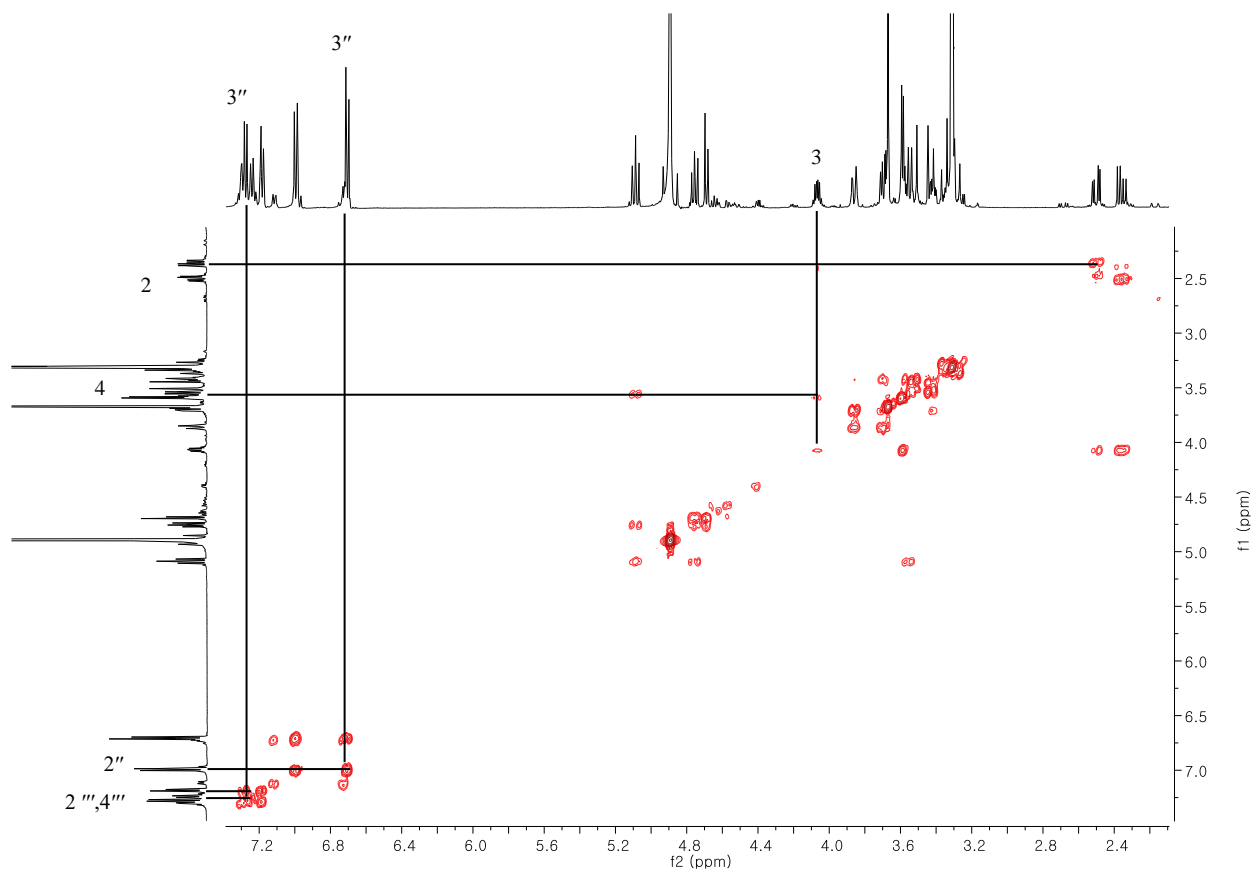


Fig. 26. ^1H - ^1H COSY spectrum of compound **5**

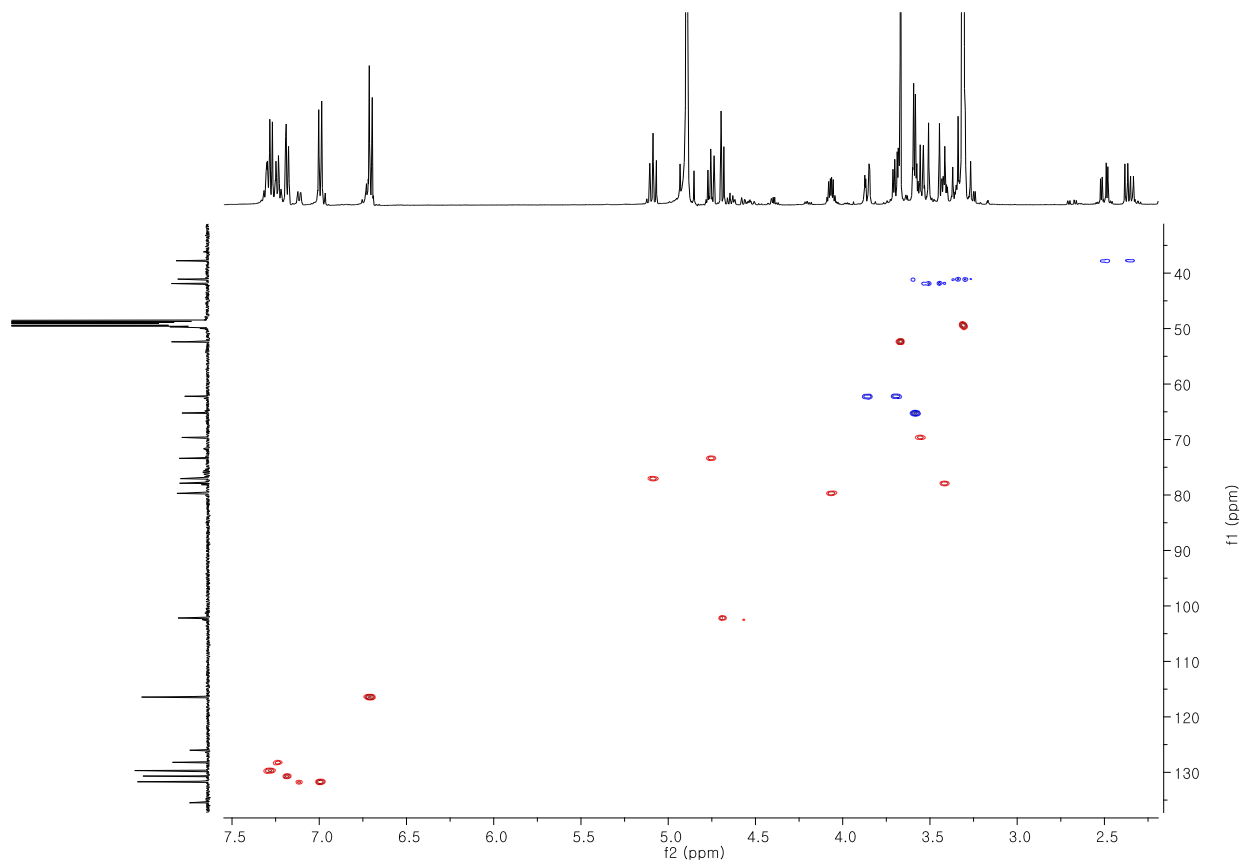


Fig. 27. HSQC spectrum of compound **5**

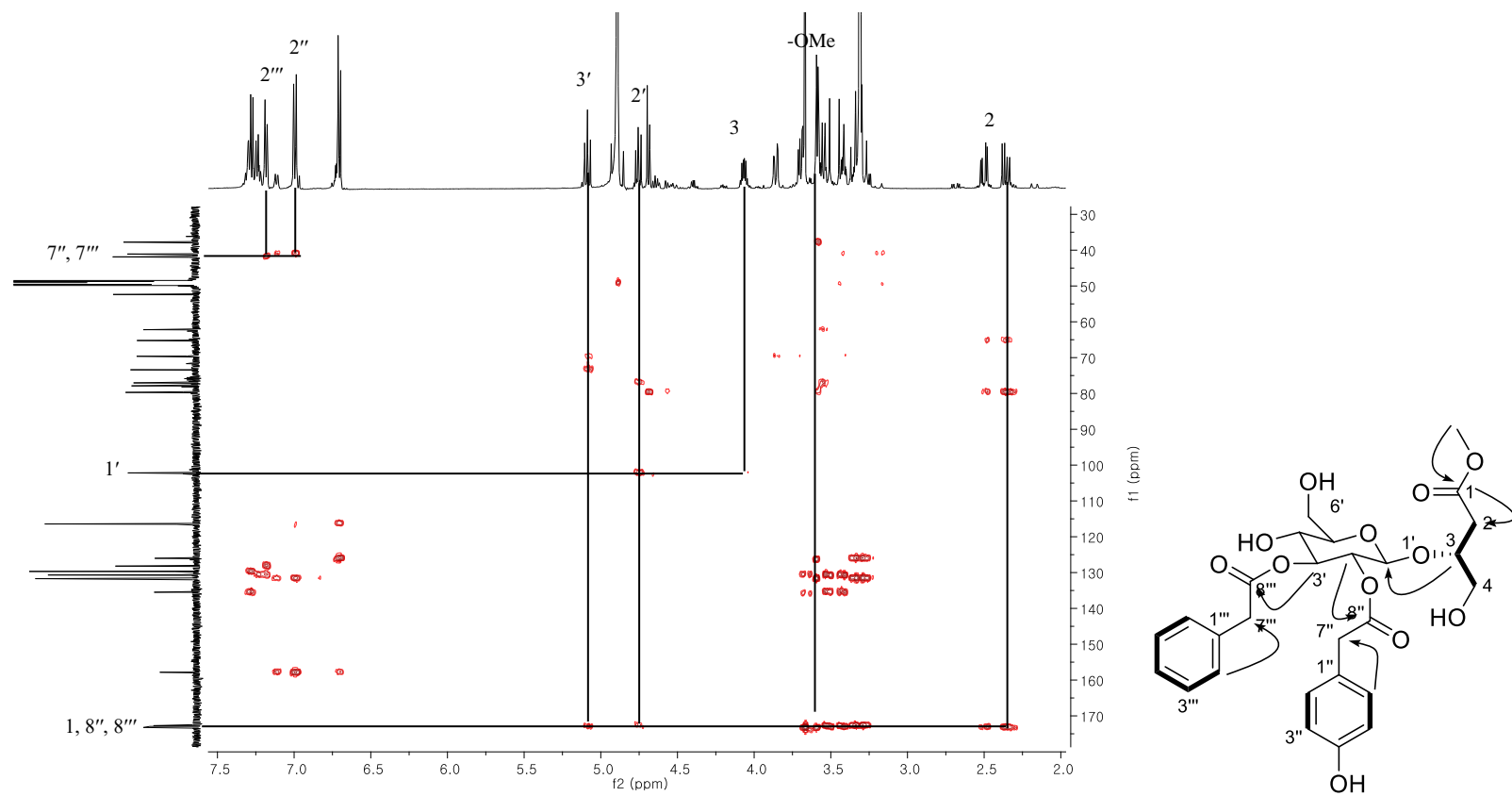


Fig. 28. HMBC spectrum of compound 5

1.6 화합물 6의 구조

화합물 6은 무색무정형 화합물로 분자식이 $C_{19}H_{26}O_{11}$ 인 화합물이다 [m/z 453.1392 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{27}H_{32}O_{12}Na$, 453.1373)]. 1H , ^{13}C NMR spectra를 통하여 당 3번위치의 functional group이 없어진 것을 제외하고 화합물 5와 같다는 것을 확인할 수 있다. 1H , ^{13}C NMR spectra에서 두 개의 carbonyl기 (δ_C 173.2, 173.2), 네 개의 aromatic carbon [δ_C/δ_H 157.6, 131.7/7.12 (2H, d, $J = 8.3$ Hz), 126.4, 116.3/6.72 (2H, d, $J = 8.3$ Hz)], 하나의 anomeric signal [δ_C/δ_H 102.4/4.57 (1H, d, $J = 8.0$ Hz)], 일곱 개의 oxygenated group [δ_C/δ_H 79.5/4.04 (1H, dd, $J = 8.1, 4.8$ Hz), 65.2/3.57 (2H, d, $J = 4.8$ Hz), 75.5/4.68 (1H, t, $J = 9.0$ Hz), 76.1/3.52 (1H, t, $J = 9.0$ Hz), 71.6/3.37 (1H, t, $J = 9.0$ Hz), 78.0/4.16 (1H, m), 62.5/3.87 (1H, d, $J = 12.0$ Hz), 3.68 (1H, m)], 한 개의 methoxyl기 [δ_C/δ_H 52.4/3.67 (3H, s)], 두 개의 methylene group [δ_C/δ_H 41.1/3.60 (2H, s), 41.0/3.59 (1H, d, $J = 4.9$ Hz), 37.7/2.48 (1H, dd, $J = 16.3, 5.0$ Hz)]을 확인할 수 있다. HMBC correlation (H-3/C-1', H-2'/C-8'')를 통하여 butanoate는 당 anomeric 위치에, phenylacetyl기는 당 2번 위치에 연결되어 있음을 알 수 있다. Mosher's method를 통해 C-3이 R형임을 동정할 수 있었고, 이에 따라 화합물 6을 methyl-3*R*-O-[2-*O*-(4-hydroxyphenylacetyl)- β -D-glucopyranosyl]-butanoate, taraxiroside F로 명명하였다.

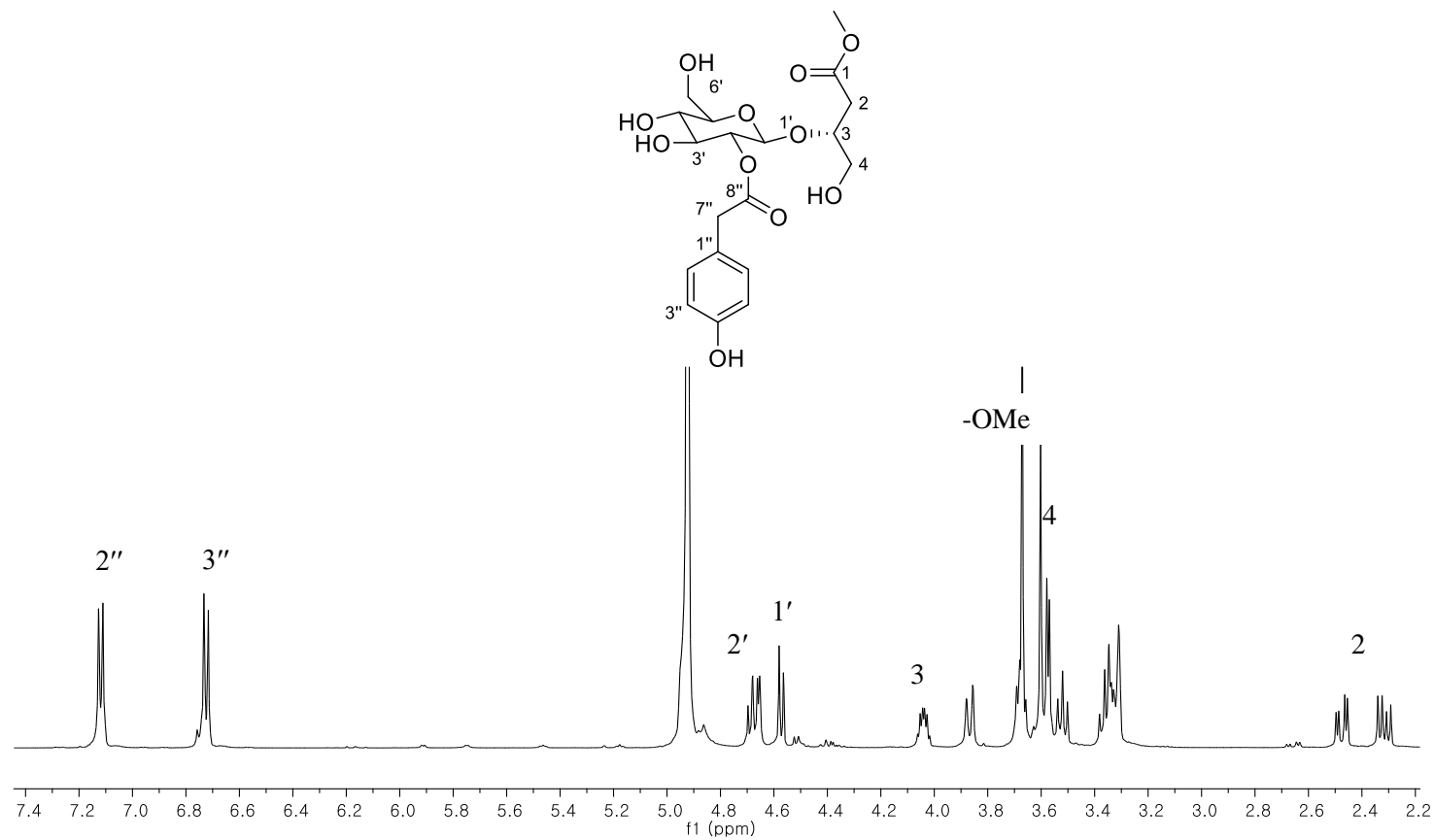


Fig. 29. ^1H -NMR spectrum of compound **6**

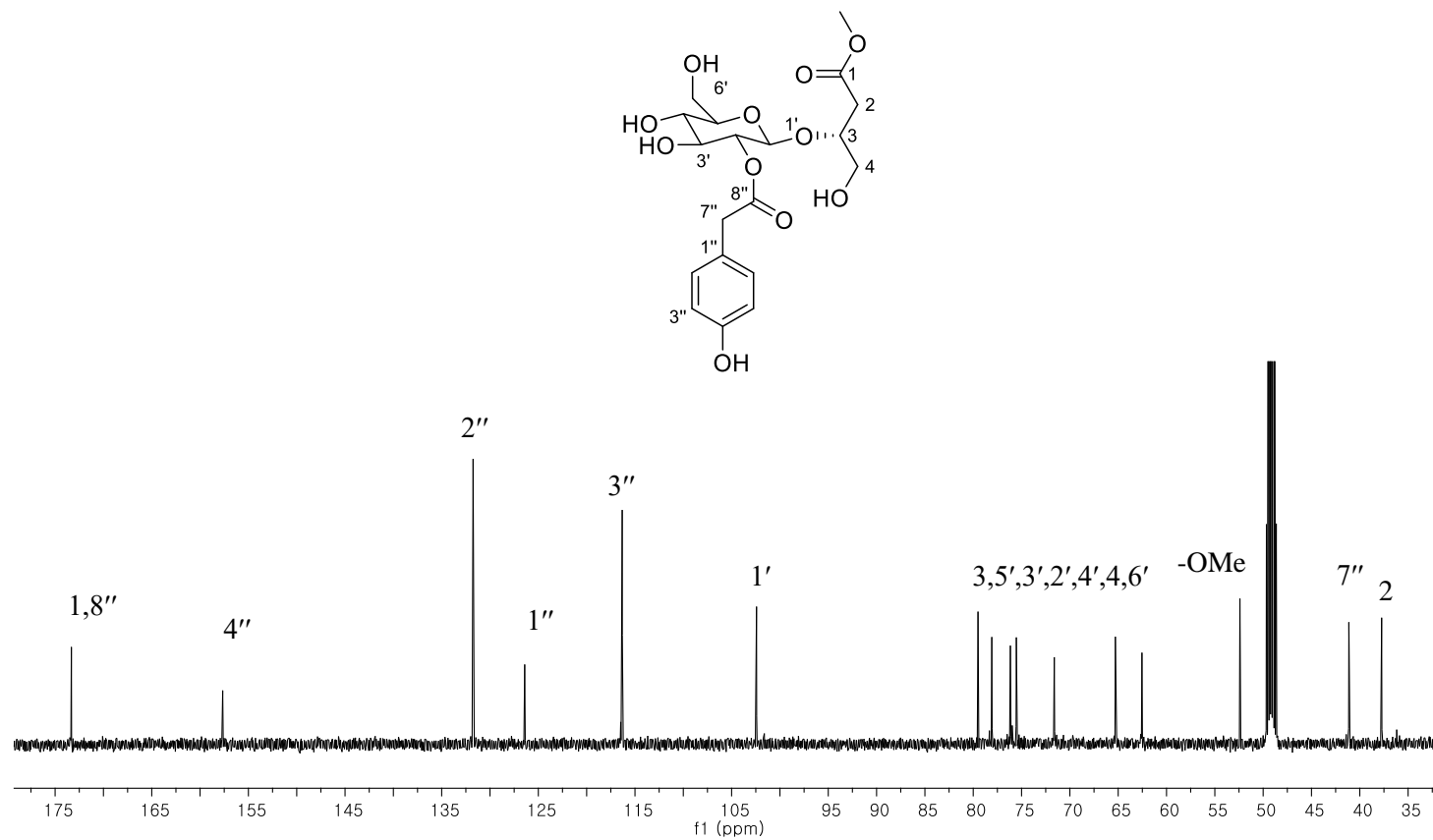


Fig. 30. ^{13}C -NMR spectrum of compound 6

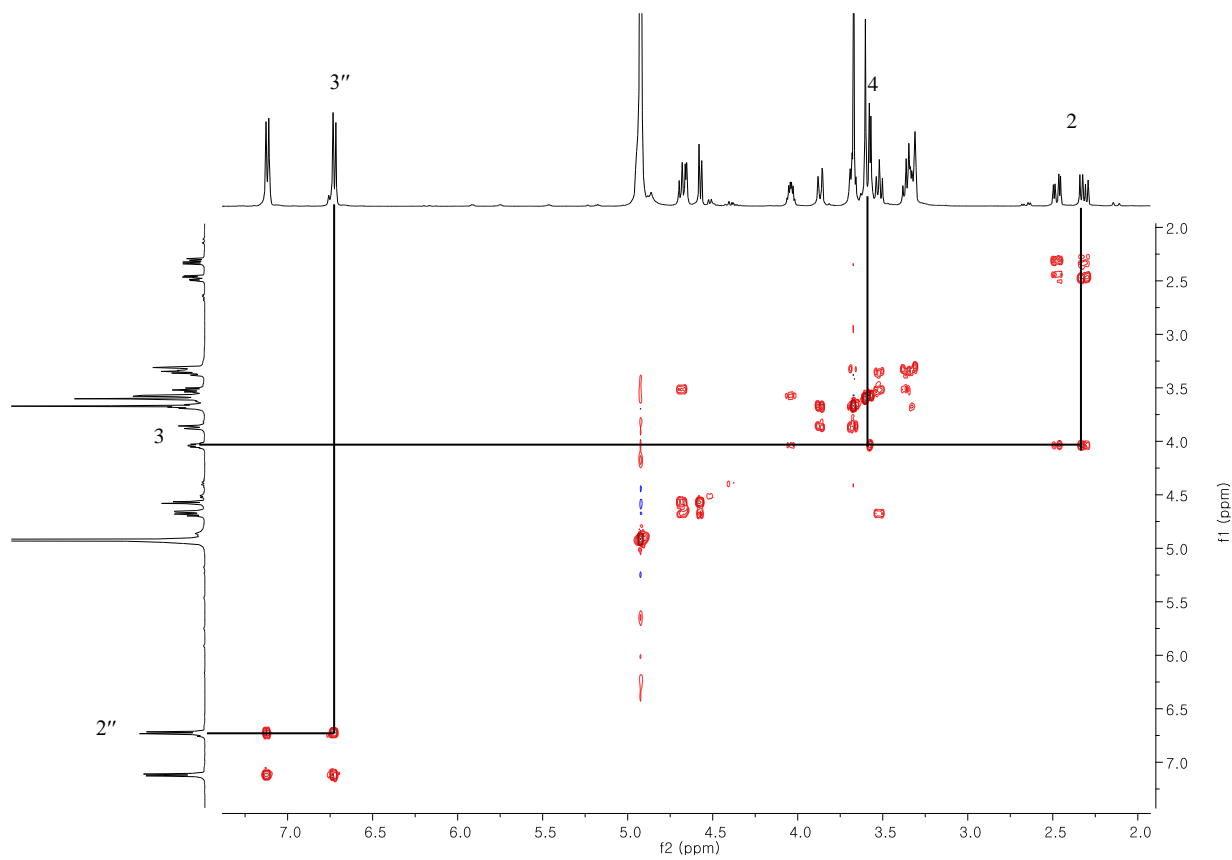


Fig. 31. ^1H - ^1H COSY spectrum of compound **6**

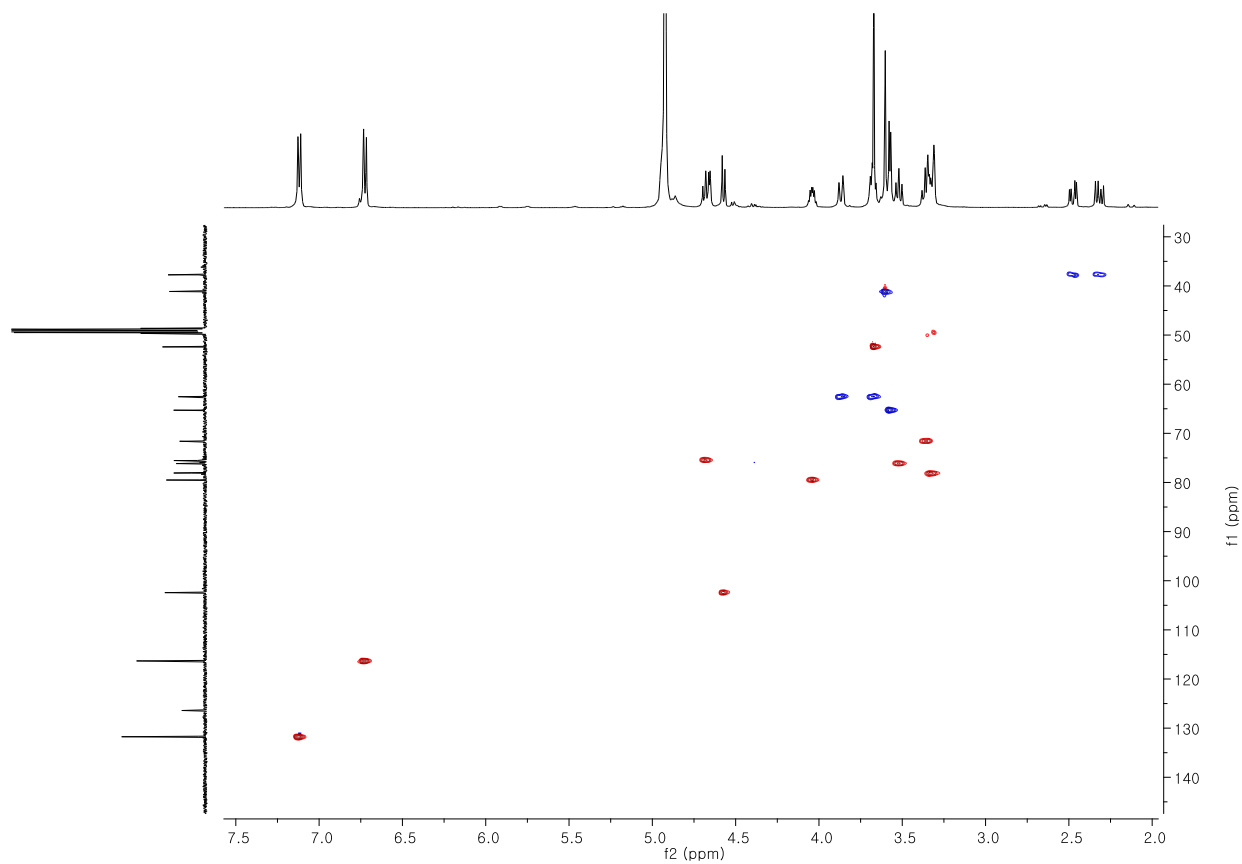


Fig. 32. HSQC spectrum of compound **6**

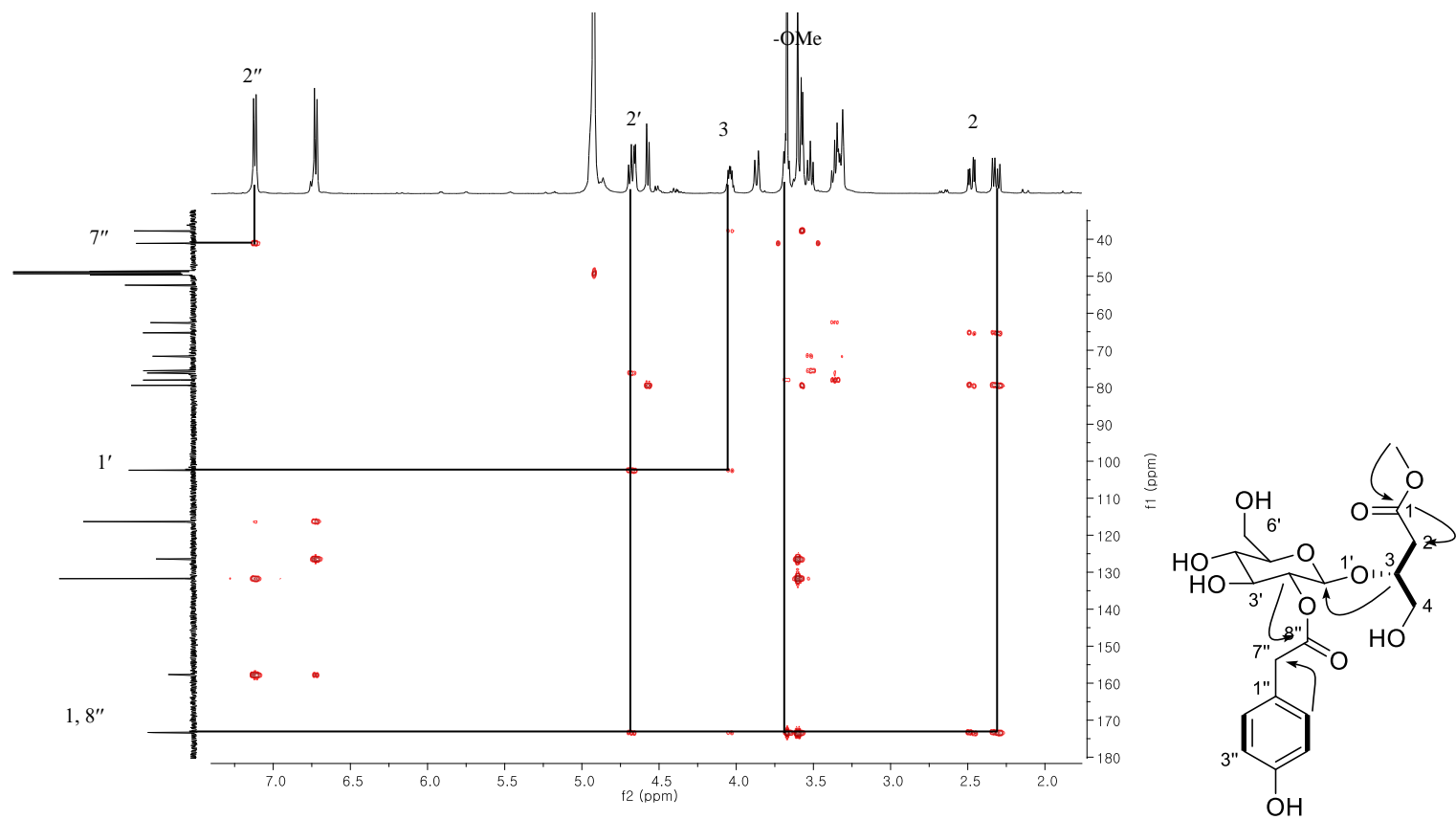


Fig. 33. HMBC spectrum of compound **6**

1.7 화합물 7의 구조

화합물 7은 무색무정형 화합물로서 분자식이 $C_{22}H_{24}O_{10}$ 이다 [m/z 471.1281 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{22}H_{24}O_{10}Na$, 471.1267)]. 1H NMR spectrum에서 δ_H 7.10, 6.74, 7.00, 6.70 피크를 통해 두 개의 1,4-치환체를, δ_H 3.48, 3.36 를 통해 두 개의 methylene기를, δ_H 5.27, 5.07, 3.81, 3.63, 3.52을 통해 하나의 cyclohexane의 존재를 추정할 수 있다. ^{13}C NMR spectrum에서 두 개의 aromatic 링 (δ_C 157.8, 157.6, 131.7, 131.5, 126.3, 126.2, 116.5, 116.3), 두 개의 carbonyl기 (δ_C 173.5, 172.6), 여섯 개의 oxygenated carbon (δ_C 74.4, 73.7, 72.7, 72.5, 72.4, 71.0) 과 두 개의 methylene 피크(δ_C 41.4, 40.9)을 확인하였다. 2D NMR spectra를 통해 두 개의 4-hydroxyphenylacetyl기가 inositol에 연결되어 있는 1차구조를 추정할 수 있다. Down-shift 된 1번, 2번 proton 과 HMBC correlation (H-1/C-8', H-2/C-8'')을 통해 연결고리를 동정하였다.

Inositol의 입체구조는 coupling constant를 통해 구할 수 있는데 (Liu et al., 2014), 세 쌍의 *trans*-diaxial proton (H-2/H-3, H-3/H-4, H-4/H-5)은 J value 가 9–10 Hz, 두 쌍의 equatorial-axial proton 그리고 한 쌍의 equatorial proton은 J value 가 4 Hz 이하이다. 그러므로 H-2, H-3, H-4, H-5 은 axial, 나머지 H-1, H-6은 equatorial 형태임을 추정할 수 있다.

더 정확한 입체구조를 동정하기 위하여 화합물 7을 산 가수분해하여 inositol만 분리한 뒤, 표준품의 1H NMR spectrum과 비교를 하였다 (Table3). 그 결과 *chiro*-inositol임을 알 수 있었고, 선광도 값 $[[\alpha]_D^{20} +53.1$ (c 0.05, H_2O)] 을 통해 *D-chiro* inositol로 동정하였다 (Ribeiro et al., 2013).

결론적으로, 화합물 **7**을 1D-1,2-di-*O*-4-hydroxyphenylacetyl-*chiro*-inositol 로 동정하였다.

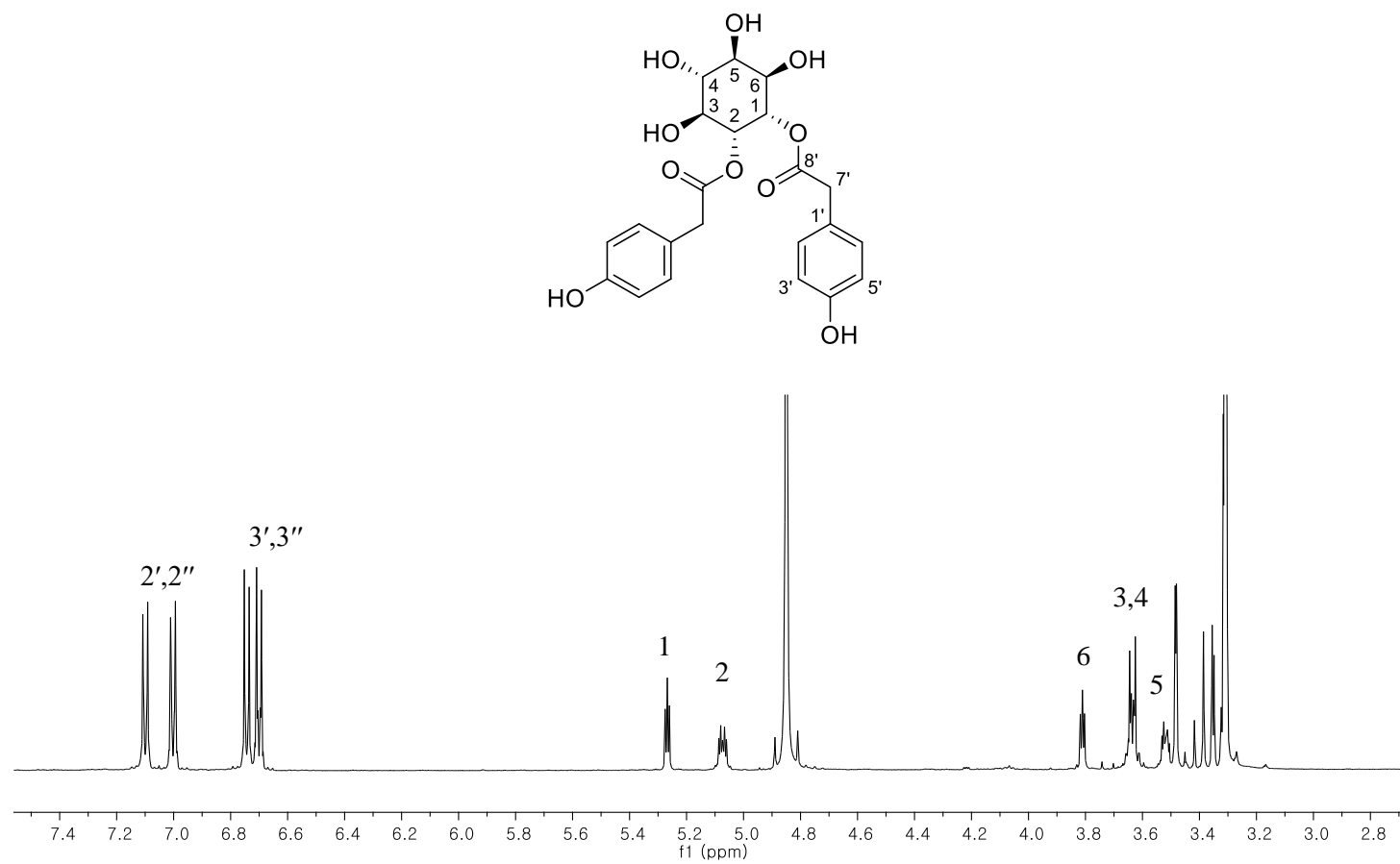


Fig. 34. ^1H -NMR spectrum of compound 7

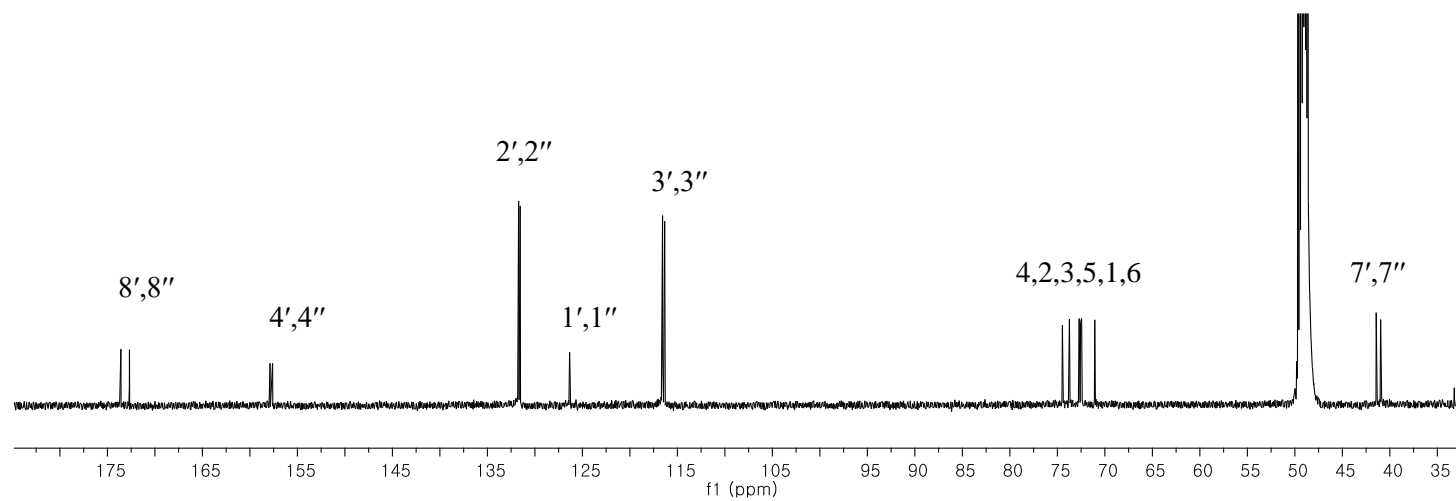
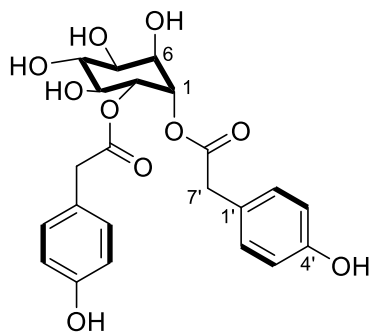


Fig. 35. ^{13}C -NMR spectrum of compound 7

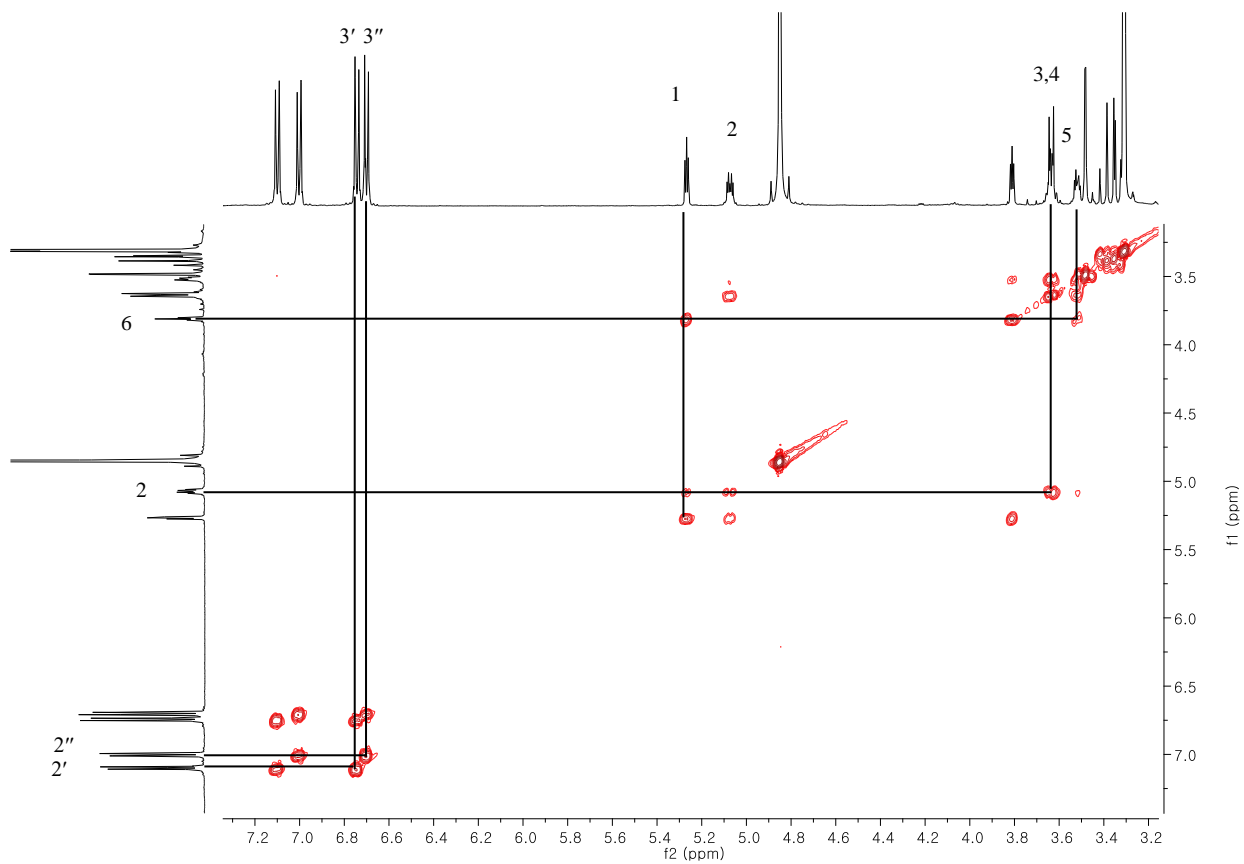


Fig. 36. ^1H - ^1H COSY spectrum of compound 7

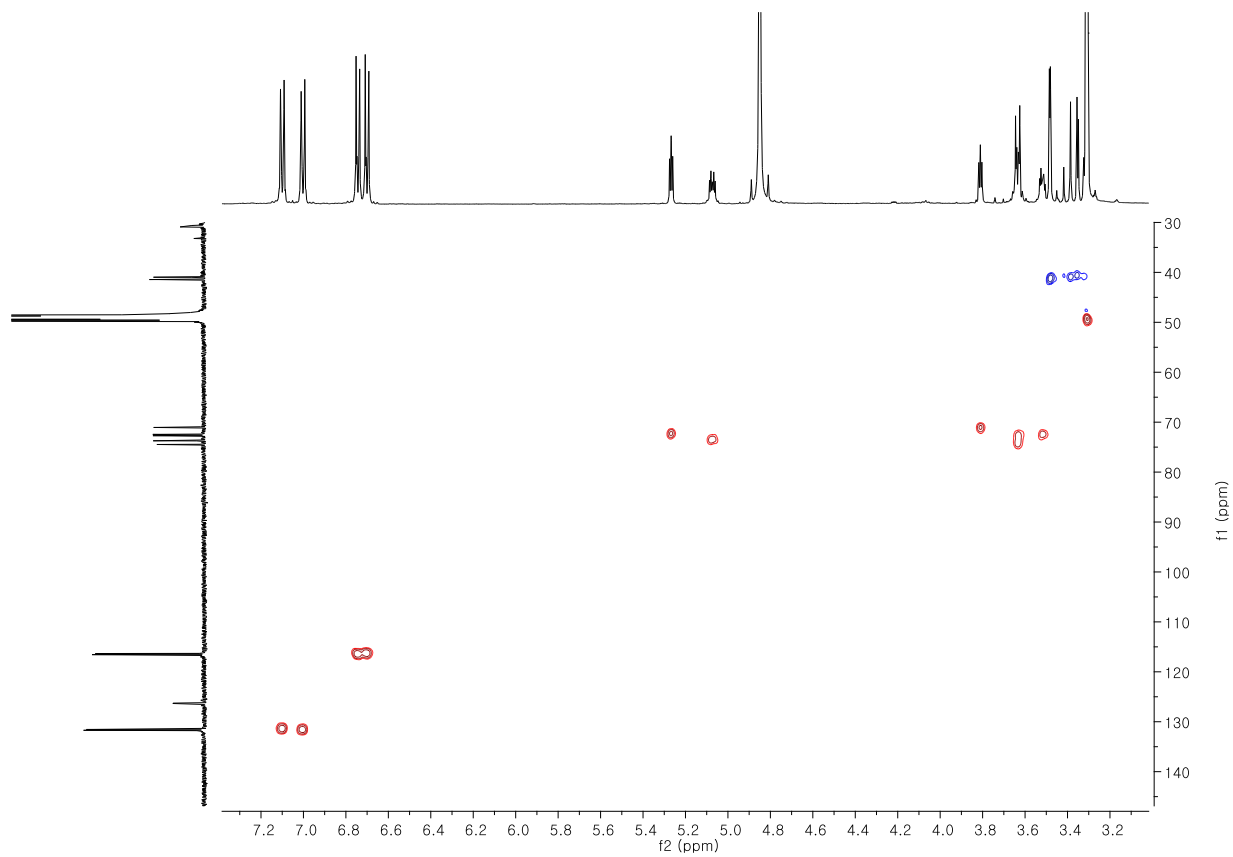


Fig. 37. HSQC spectrum of compound **7**

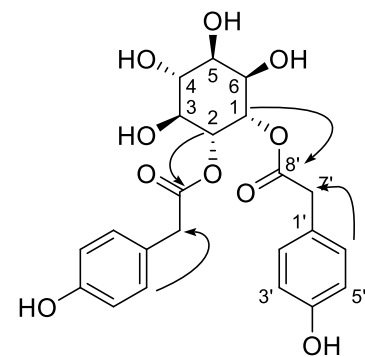
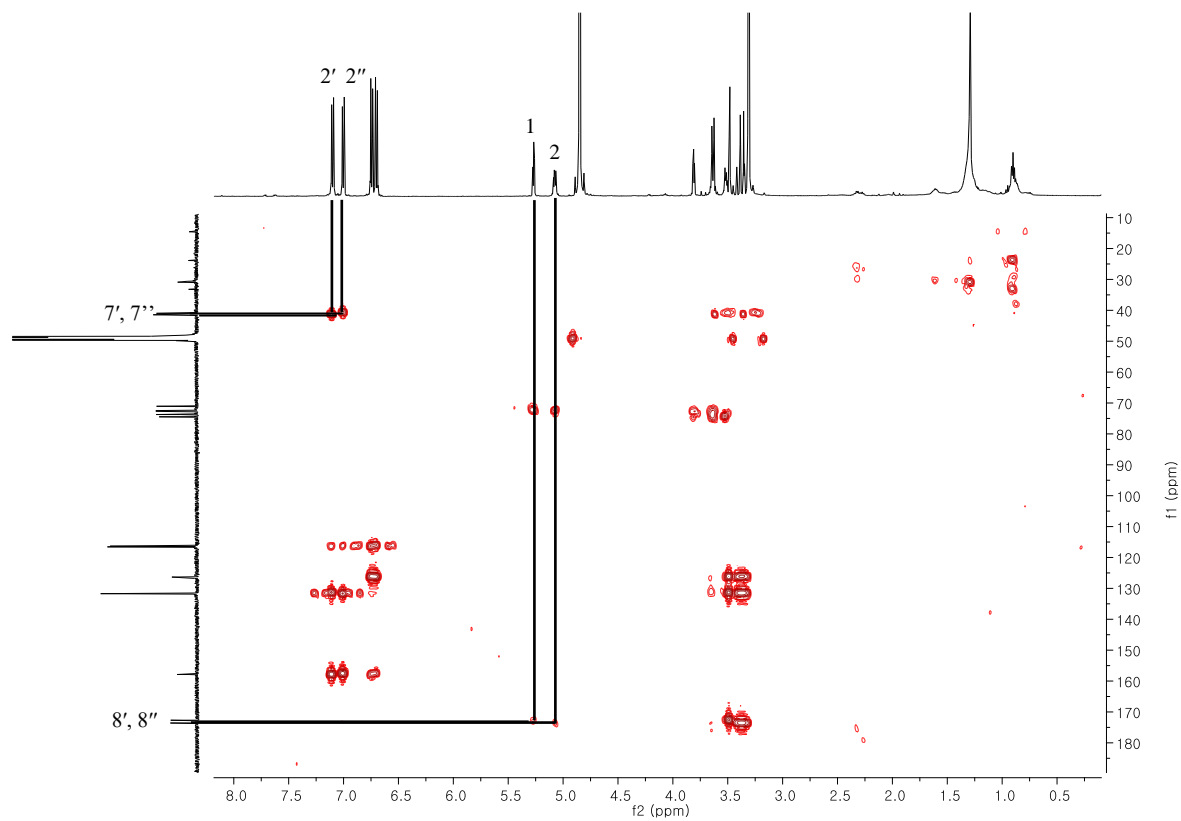


Fig. 38. HMBC spectrum of compound **7**

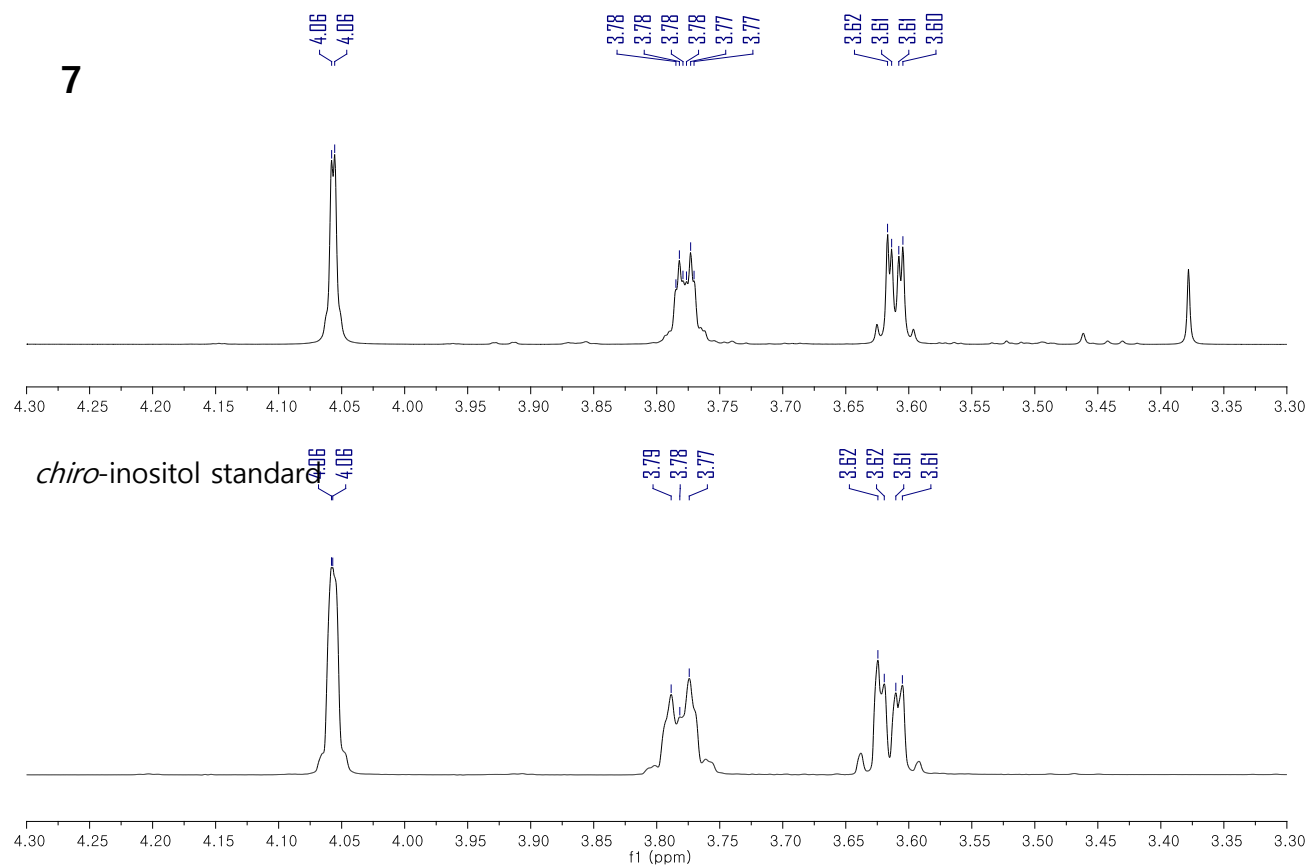


Fig. 39. ^1H -NMR spectra of inositol of **7** and *chiro*-inositol standard

1.8 화합물 8의 구조

무색 무정형 화합물 8은 분자식이 $C_{22}H_{24}O_{10}$ 이다 [m/z 471.1281 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{22}H_{24}O_{10}Na$, 471.1267)]. 1H , ^{13}C NMR spectra가 화합물 7과 거의 유사하며, functional group의 위치가 다르다. 1H NMR spectrum를 통해 두 개의 1,4-치환체 [δ_H 7.13 (2H, d, $J = 8.6$ Hz), 7.12 (2H, d, $J = 8.5$ Hz), 6.72 (2H, d, $J = 8.5$ Hz), 6.72 (2H, d, $J = 8.5$ Hz)], 두 개의 methylene기 [δ_H 3.64 (2H, d, $J = 2.3$ Hz), 3.63 (2H, d, $J = 1.8$ Hz)], 하나의 cyclohexane [δ_H 5.19 (1H, t, $J = 9.8$ Hz), 5.10 (1H, dd, $J = 10.2, 3.1$ Hz), 4.04 (1H, t, $J = 3.5$ Hz), 3.92 (1H, t, $J = 9.8$ Hz), 3.92 (1H, t, $J = 3.2$ Hz), 3.87 (1H, dd, $J = 9.9, 3.1$ Hz)]의 존재를 추정할 수 있다. ^{13}C NMR spectrum에서 두 개의 aromatic 링 (δ_C 157.6, 157.5, 131.7, 131.6, 126.7, 126.5, 116.3, 116.2), 두 개의 carbonyl기 (δ_C 174.2, 173.8), 여섯 개의 oxygenated carbon (δ_C 77.1, 75.8, 73.9, 71.0, 70.6, 70.5)과 두 개의 methylene 피크 (δ_C 41.2, 41.0)을 확인하였다. Down-field shift 된 1번, 3번 proton으로 두 개의 4-hydroxyphenylacetyl기가 1, 3번에 연결되어 있는 것을 추정할 수 있으며, HMBC를 통하여 이를 확인하였다. 입체구조는 coupling constant에 의거하여 H-1, H-2, H-3 그리고 H-6은 axial, 나머지 H-4, H-5는 equatorial 형태임을 확인하였다. 산 가수분해를 한 뒤, inositol의 NMR과 선광도 값 $[[\alpha]_D^{20} + 48.0$ (c 0.1, H_2O)]으로 D-chiro-inositol임을 확인하였고, 이것으로 화합물 8을 1D-1,3-di-O-4-hydroxyphenylacetyl-chiro-inositol로 동정하였다.

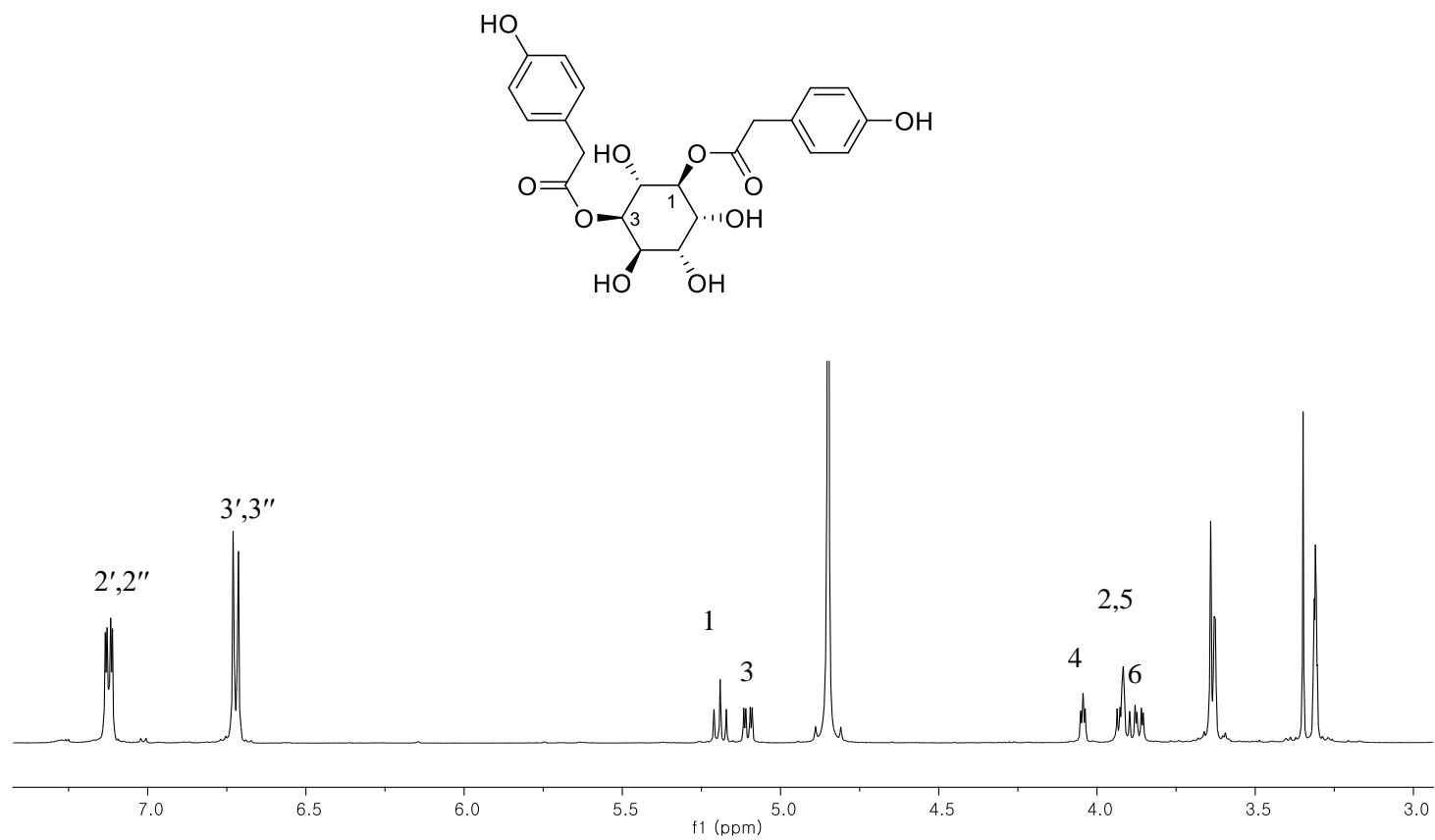


Fig. 40. ^1H -NMR spectrum of compound **8**

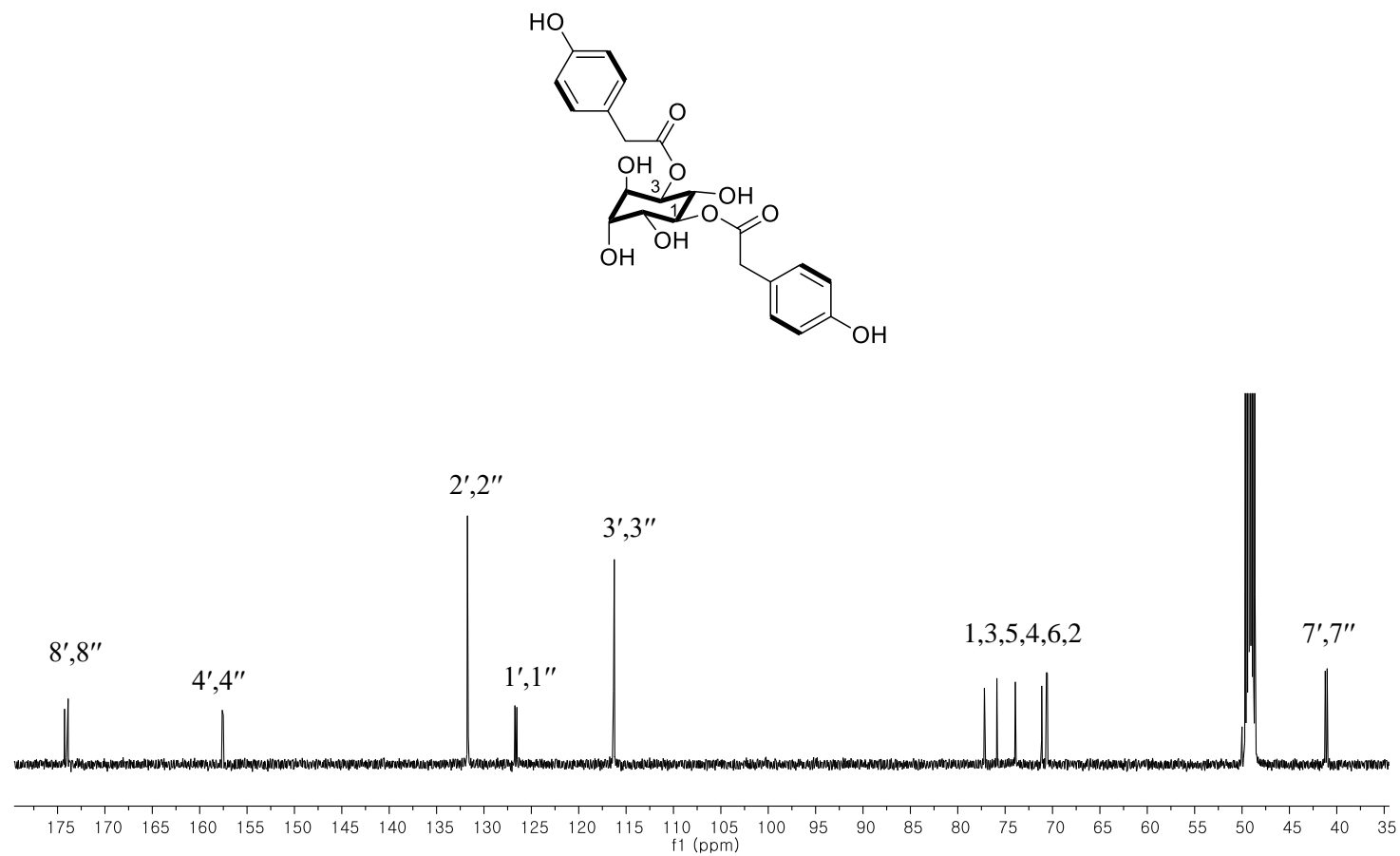


Fig. 41. ^{13}C -NMR spectrum of compound **8**

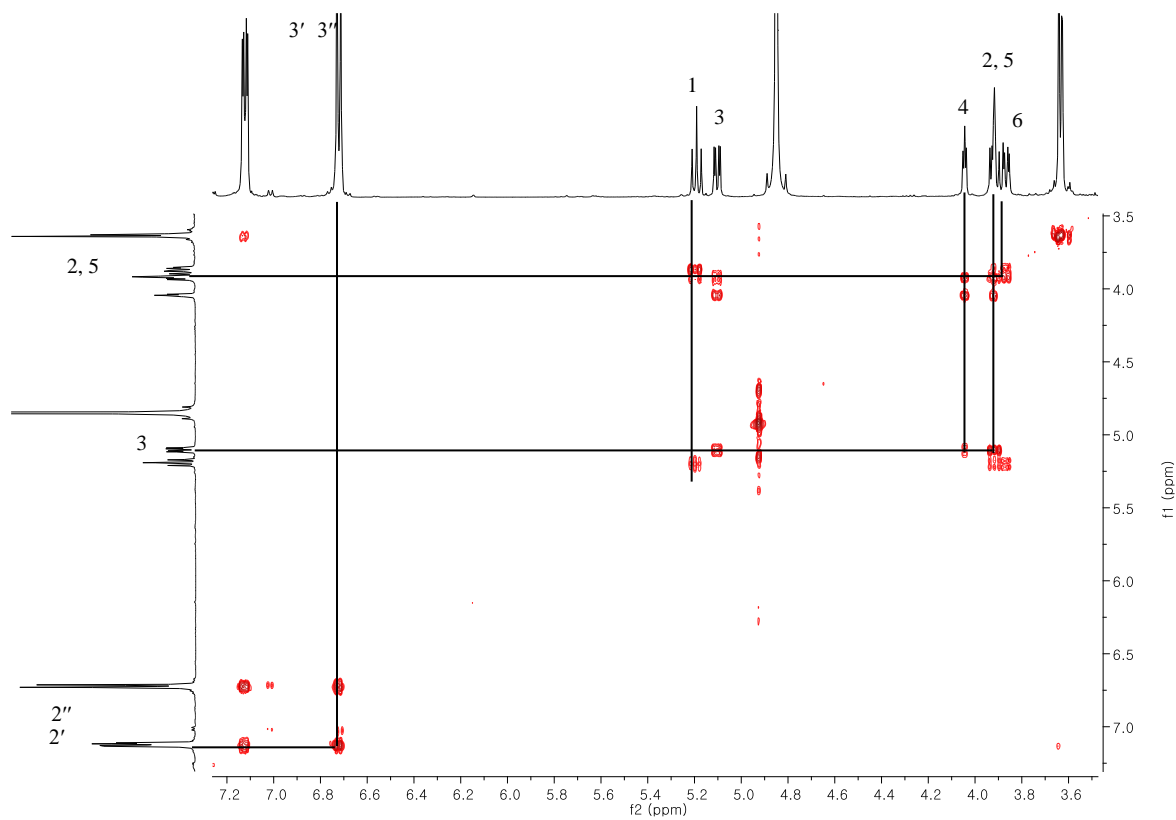


Fig. 42. ^1H - ^1H COSY spectrum of compound **8**

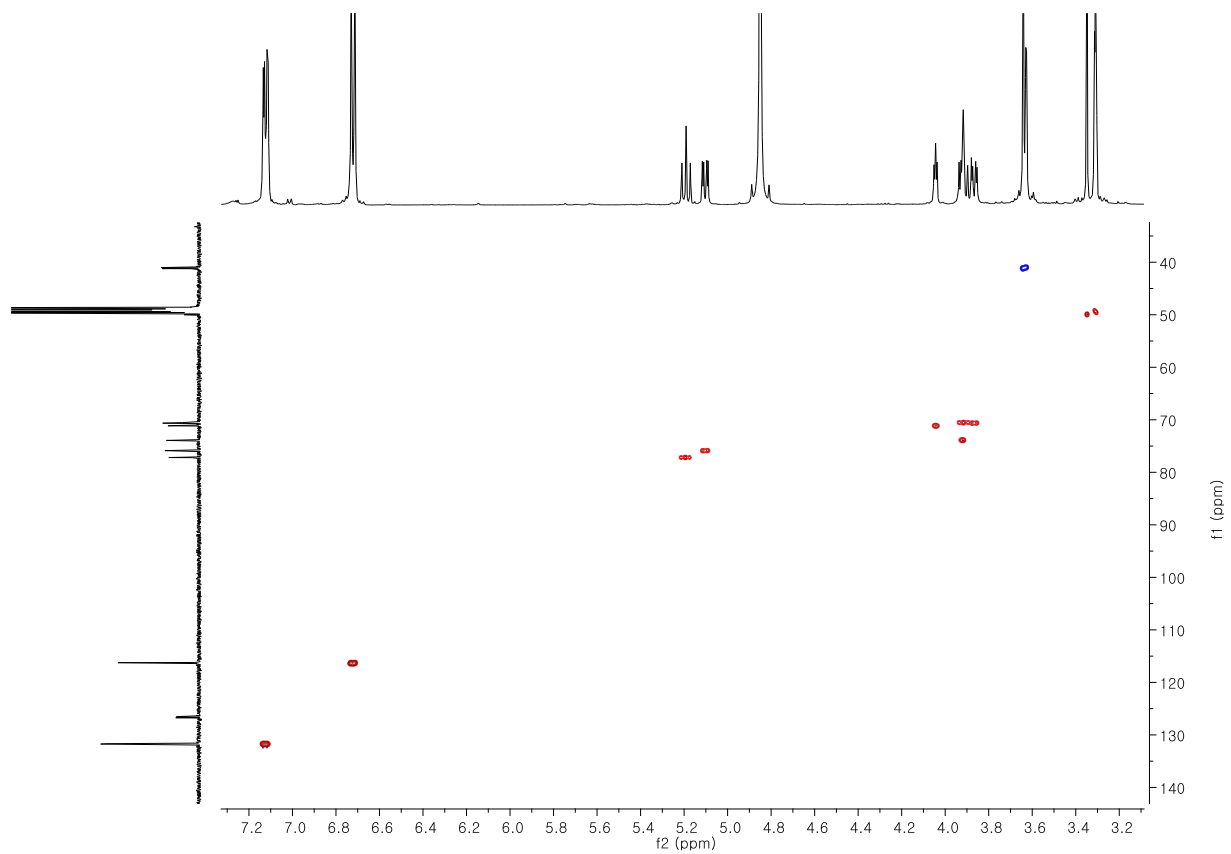


Fig. 43. HSQC spectrum of compound **8**

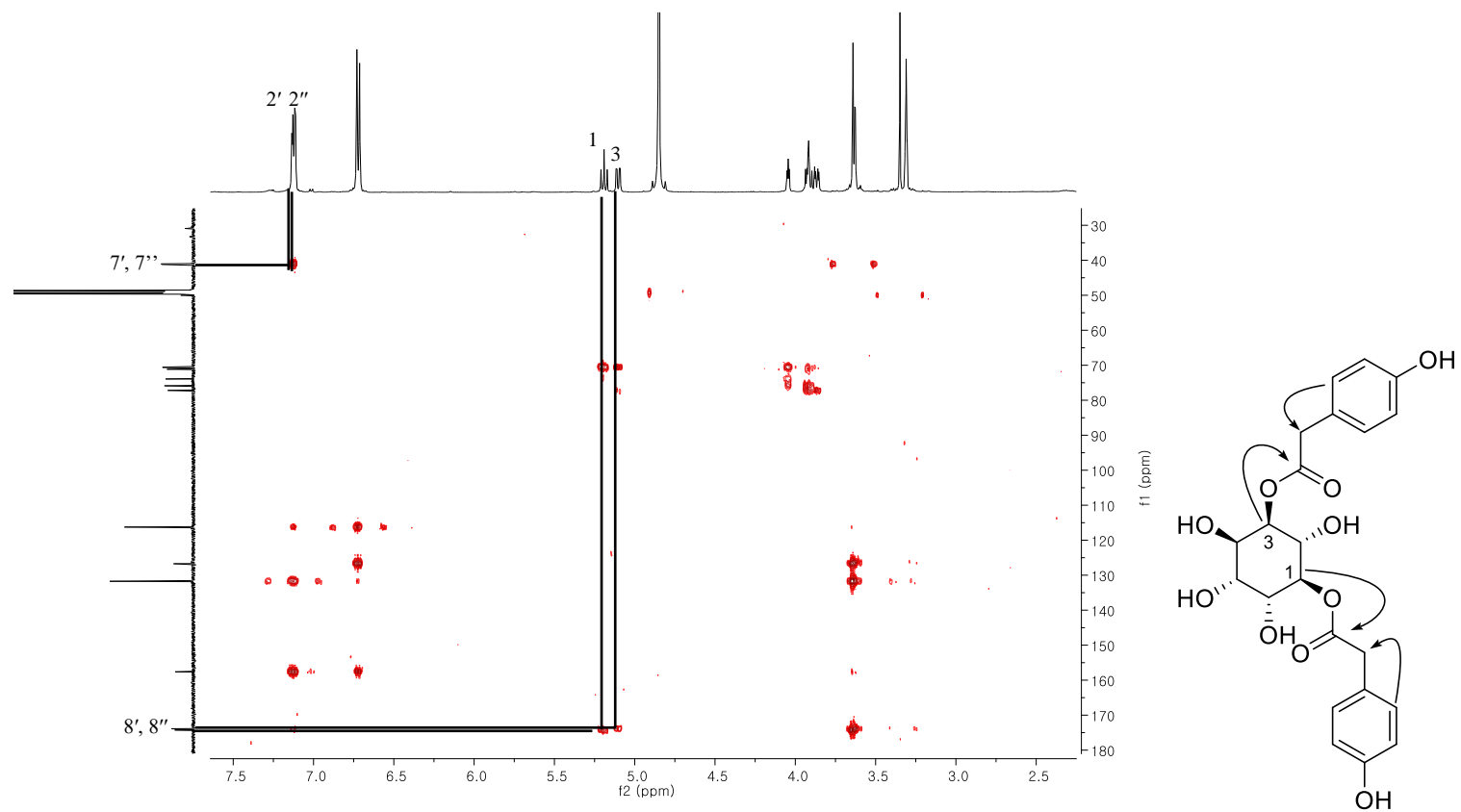


Fig. 44. HMBC spectrum of compound **8**

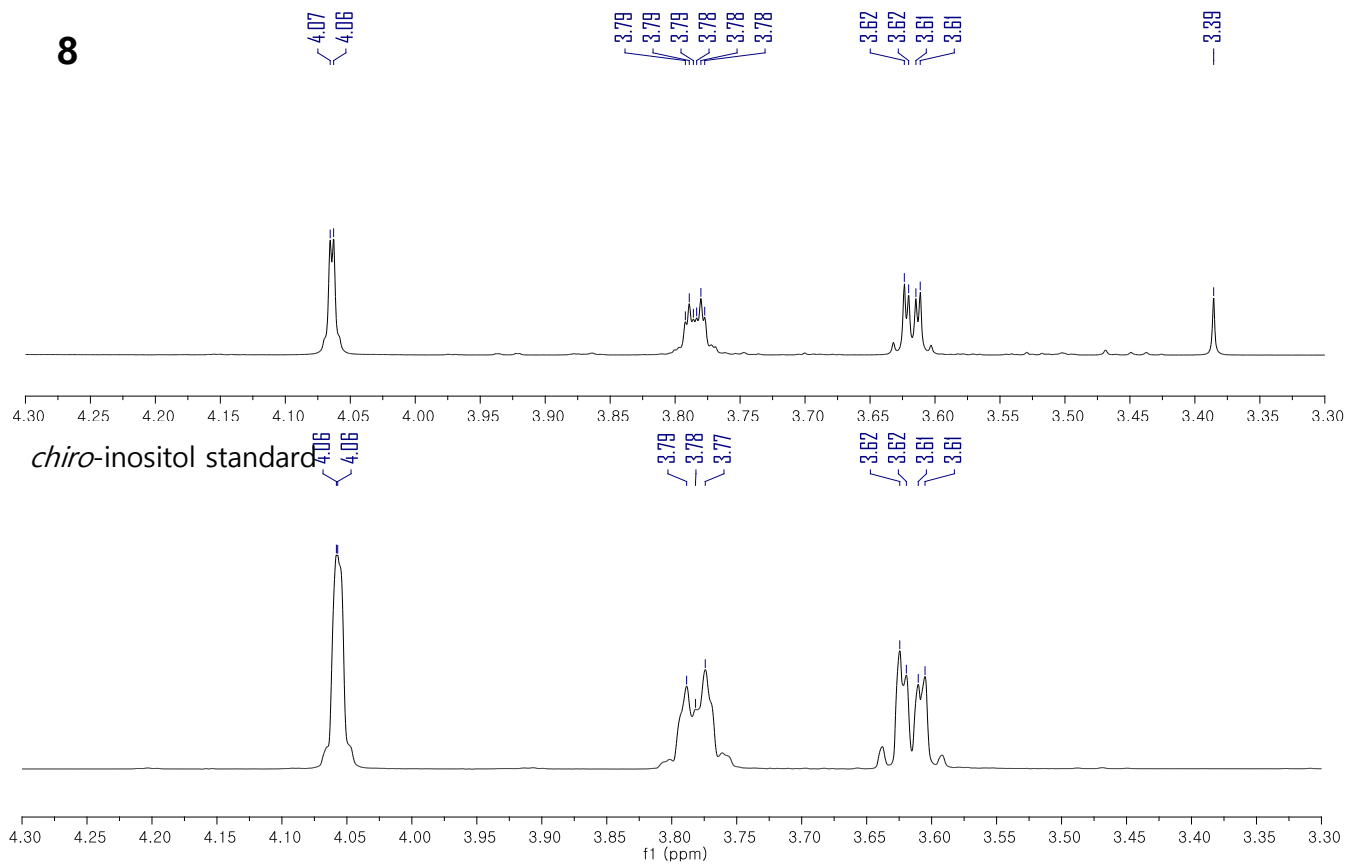


Fig. 45. ^1H -NMR spectra of inositol of **8** and *chiro*-inositol standard

1.9 화합물 9의 구조

화합물 9는 무색무정형 화합물이며 HRESIMS 데이터 [m/z 605.1664 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{30}H_{30}O_{12}Na$, 605.1635)]을 통하여 분자식 $C_{30}H_{30}O_{12}$ 을 구할 수 있다. 1H , ^{13}C NMR spectra를 통하여 화합물 9의 구조가 화합물 7과 매우 유사함을 알 수 있다. 다른 점은 하나의 4-hydroxyphenylacetyl기가 추가되었다는 점이다. 1H NMR spectrum에서 세 개의 1,4-치환체 [δ_H 7.10 (2H, d, $J = 8.5$ Hz), 7.10 (2H, d, $J = 8.5$ Hz), 7.10 (2H, d, $J = 8.5$ Hz), 6.74 (2H, d, $J = 8.5$ Hz), 6.71 (2H, d, $J = 8.5$ Hz), 6.71 (2H, d, $J = 8.5$ Hz)], 세 개의 methylene기 [δ_H 3.61 (2H, d, $J = 4.3$ Hz), 3.50 (2H, m), 3.50 (2H, m)], 하나의 cyclohexane [δ_H 5.25 (1H, t, $J = 3.6$ Hz), 5.08 (1H, t, $J = 3.7$ Hz), 4.83 (1H, dd, $J = 10.0, 3.3$ Hz), 3.71 (1H, dd, $J = 9.7, 3.3$ Hz), 3.64 (1H, overlap), 3.54 (1H, overlap)]의 존재를 추정할 수 있다. ^{13}C NMR spectrum에서 세 개의 aromatic 링 (δ_C 157.9, 157.6, 157.6, 131.7, 131.6, 131.5, 126.1, 126.1, 126.0, 116.5, 116.5, 116.3), 세 개의 carbonyl기 (δ_C 173.4, 172.8, 172.2), 여섯 개의 oxygenated carbon (δ_C 74.6, 73.6, 72.4, 72.3, 70.7, 69.0)과 세 개의 methylene 피크 (δ_C 41.2, 40.9, 40.8)를 확인하였다. Chemical shift와 HMBC를 통해 inositol 3번위치에 functional group이 연결되어있다는 것을 추정할 수 있다. 입체구조는 coupling constant를 통해 H-3, H-4, H-5, H-6가 axial, H-1, H-2는 equatorial 형태임을 동정하였다. 산 가수분해 후 1H NMR spectrum과 선광도 값 [$[\alpha]_D^{20} +55.7$ (c 0.1, H_2O)]을 통하여 D-*chiro*-inositol을 동정하였고,

위와 같은 결과로 화합물 **9**를 1D-1,2,3-tri-*O*-4-hydroxyphenylacetyl-*chiro*-inositol로 동정하였다.

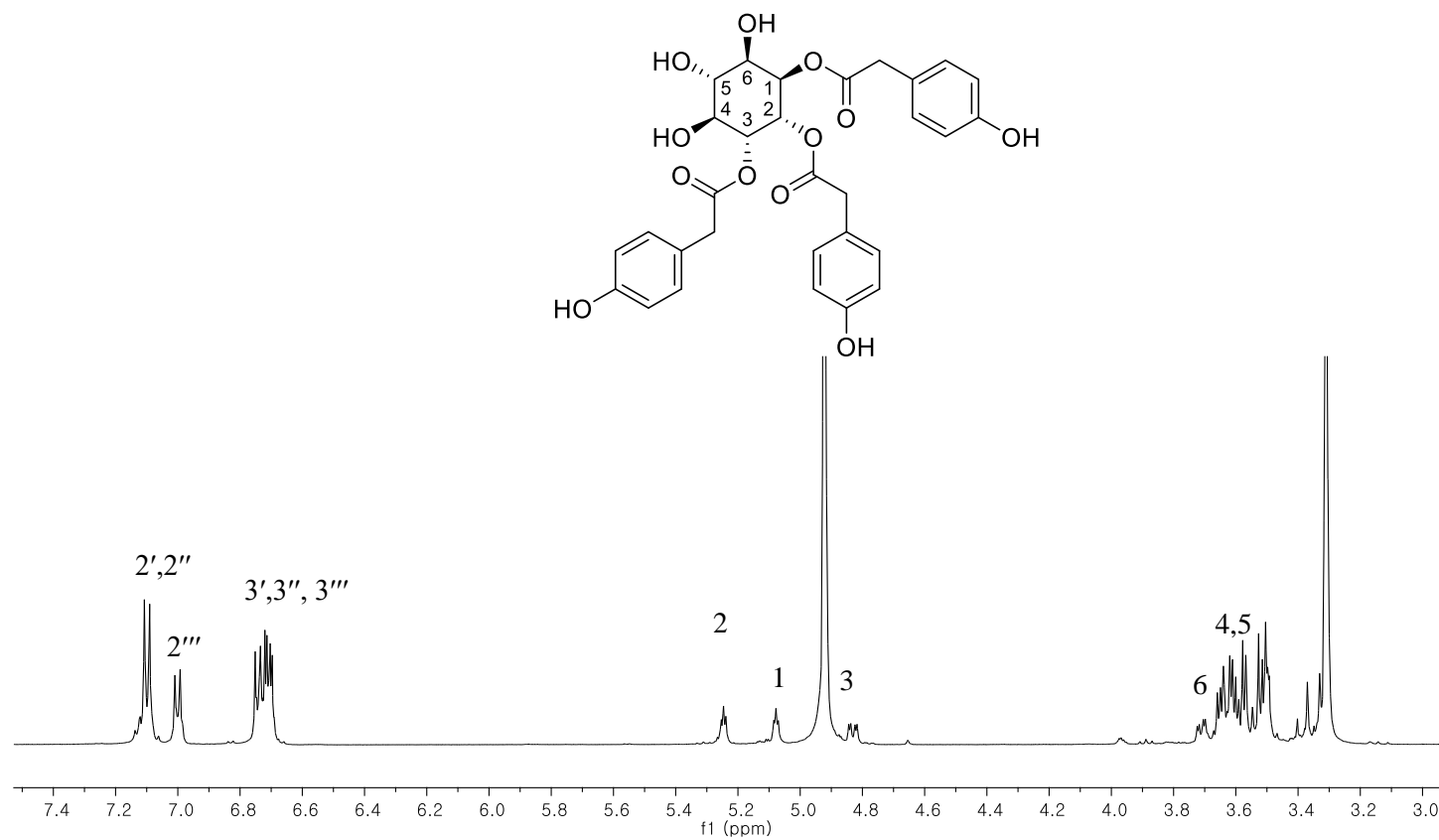


Fig. 46. ^1H -NMR spectrum of compound **9**

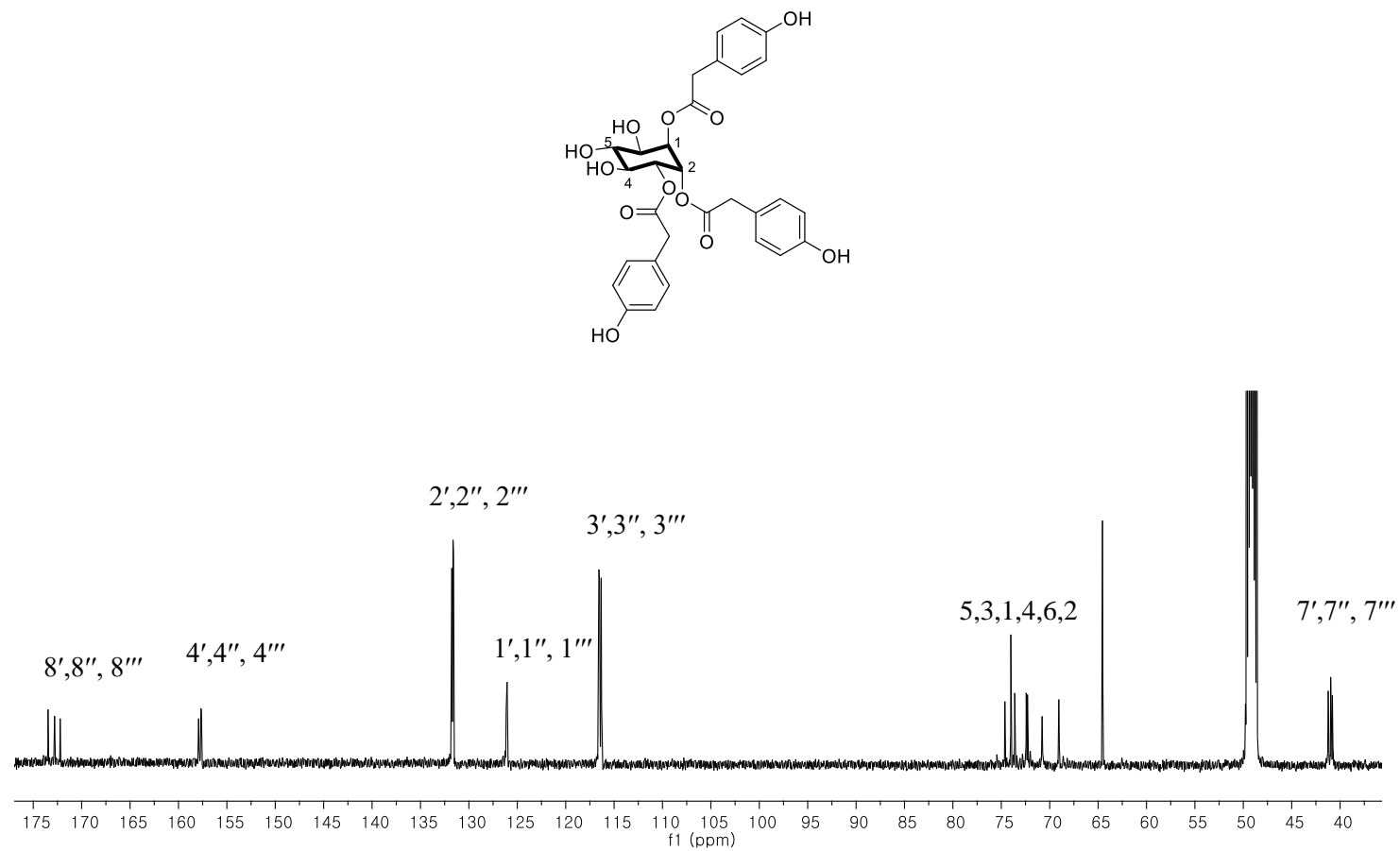


Fig. 47. ^{13}C -NMR spectrum of compound **9**

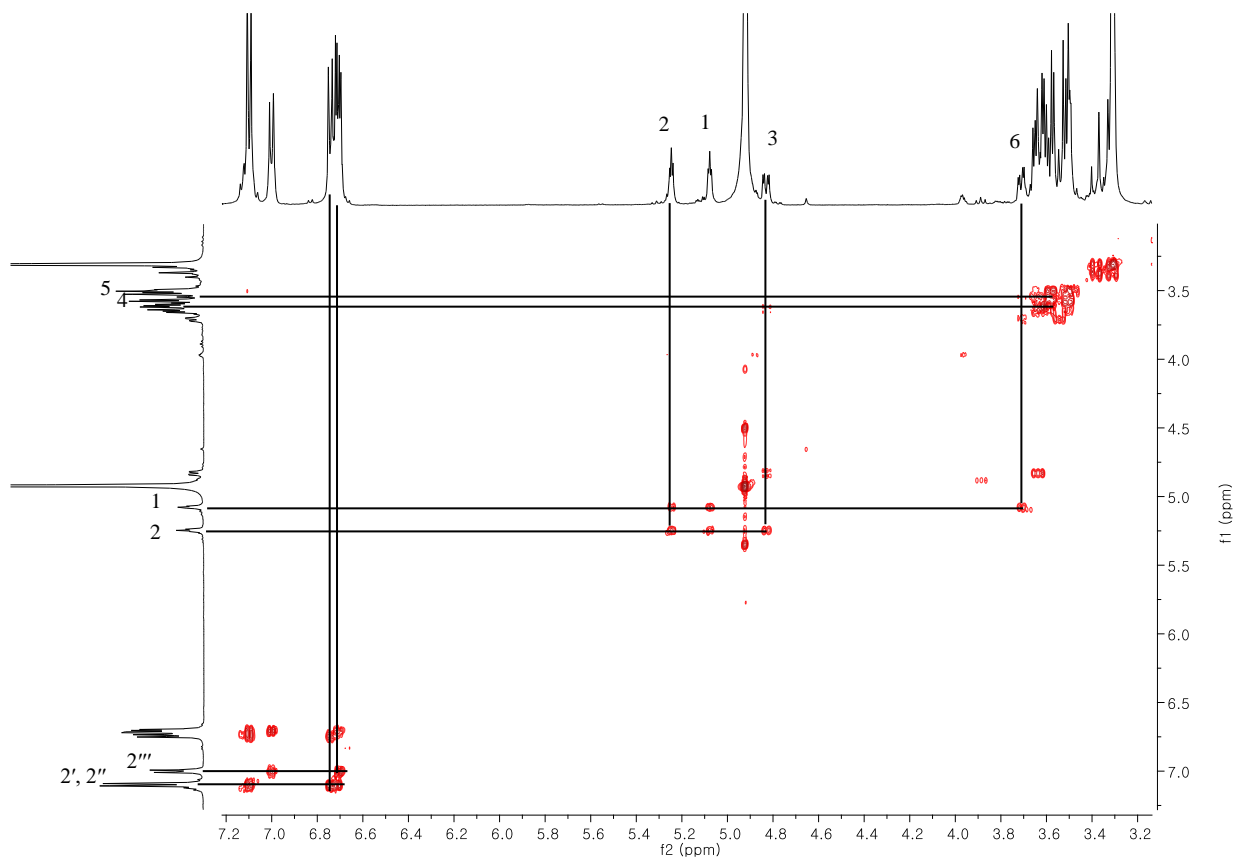


Fig. 48. ^1H - ^1H COSY spectrum of compound **9**

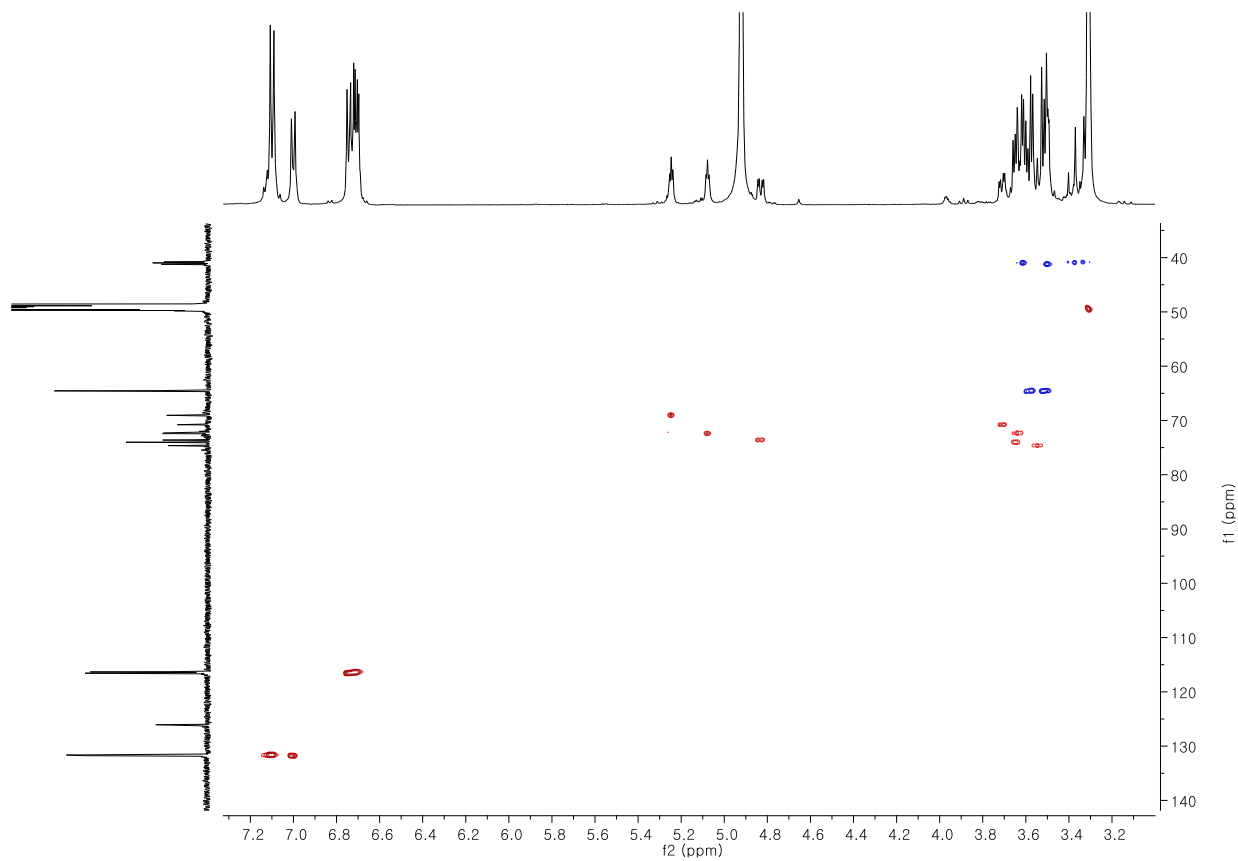


Fig. 49. HSQC spectrum of compound **9**

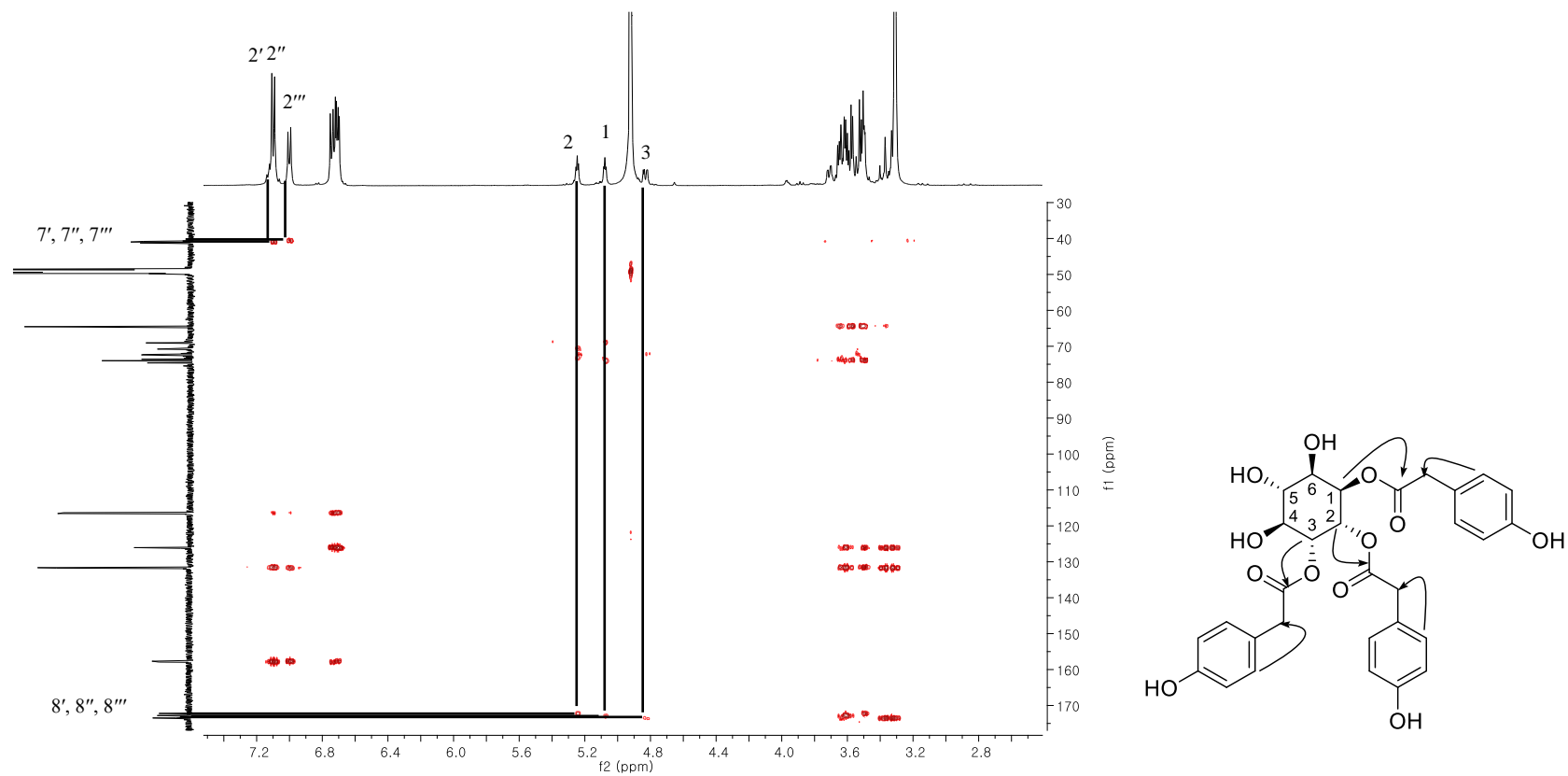


Fig. 50. HMBC spectrum of compound **9**

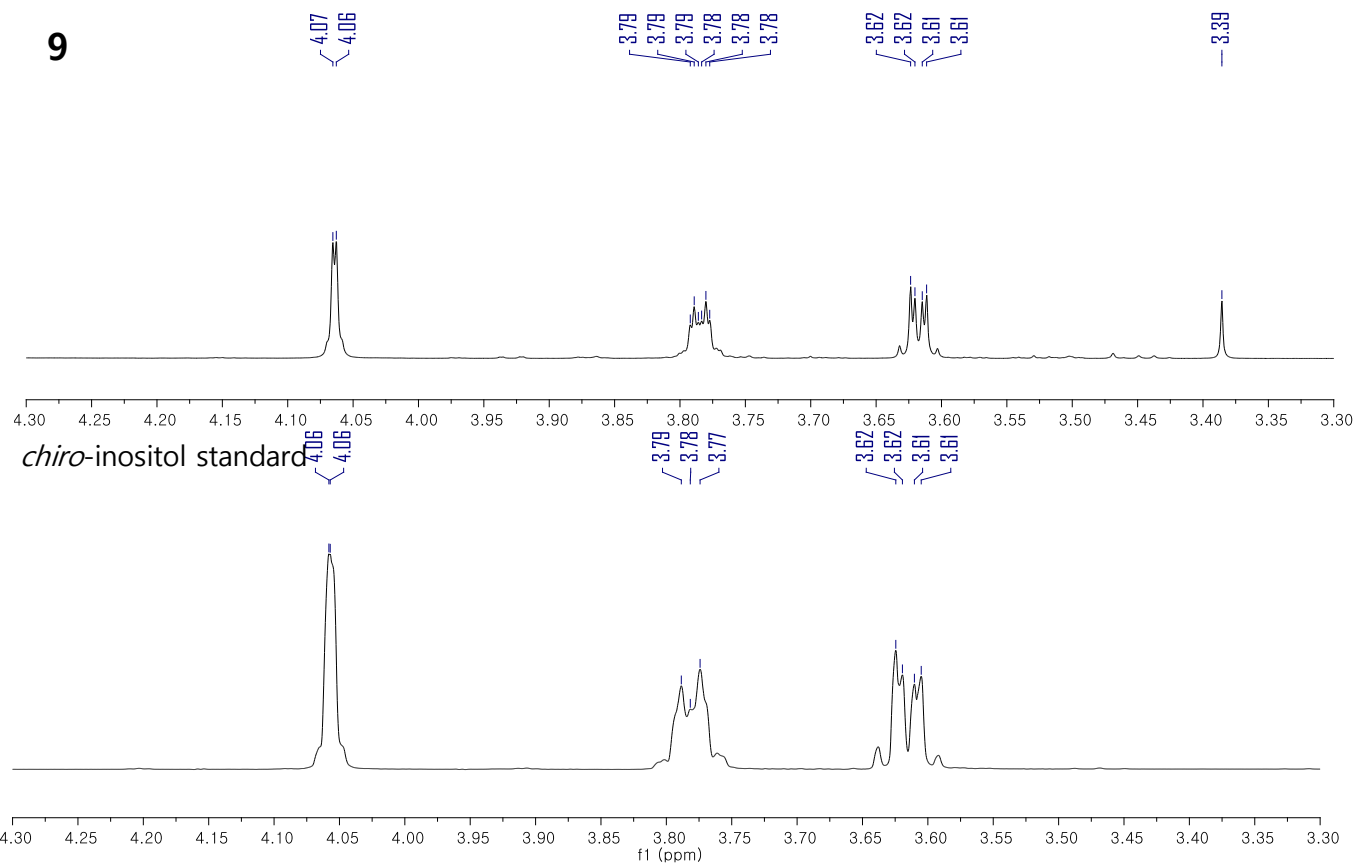


Fig. 51. ¹H-NMR spectra of inositol of **9** and *chiro*-inositol standard

1.10 화합물 10의 구조

화합물 10은 무색무정형 화합물로 HRESIMS [m/z 581.1672 [M-H]⁻, (calcd. for C₃₀H₂₉O₁₂, 581.1659)]를 통하여 분자식 C₃₀H₃₀O₁₂을 구하였다. 1D NMR spectra가 화합물 9와 functional group의 연결부위를 제외하면 거의 유사하다. ¹H NMR spectrum에서 세 개의 1,4-치환체 [δ_H 7.13 (2H, d, J = 8.6 Hz), 7.11 (2H, d, J = 8.6 Hz), 6.99 (2H, d, J = 8.6 Hz), 6.74 (2H, d, J = 8.6 Hz), 6.73 (2H, d, J = 8.6 Hz), 6.70 (2H, d, J = 8.6 Hz)], 세 개의 methylene기 [δ_H 3.64 (2H, d, J = 2.4 Hz), 3.51 (2H, d, J = 1.6 Hz), 3.35 (2H, s)], 하나의 cyclohexane [δ_H 5.26 (1H, t, J = 3.8 Hz), 5.10 (1H, dd, J = 10.1, 3.4 Hz), 4.87 (1H, dd, J = 9.4, 3.8 Hz), 3.97 (1H, t, J = 3.8 Hz), 3.89 (1H, dd, J = 10.0, 9.4 Hz), 3.69 (1H, dd, J = 10.0, 9.5 Hz)]을, ¹³C NMR spectrum에서 세 개의 aromatic 링 (δ_C 157.8, 157.6, 157.6, 131.7, 131.6, 131.6, 126.4, 126.2, 126.1, 116.5, 116.3, 116.3), 세 개의 carbonyl기 (δ_C 173.9, 173.5, 172.6), 여섯 개의 oxygenated carbon (δ_C 75.4, 73.4, 72.8, 72.2, 72.0, 68.6)과 세 개의 methylene 피크 (δ_C 41.3, 40.9, 40.9)를 확인하였다. Down-field shift된 H-1, H-2, H-5의 chemical shift를 통하여 연결을 추정할 수 있었으며, 문헌과의 비교를 통하여 화합물 10을 1D-1,2,5-tri-*O*-4-hydroxyphenylacetyl-*chiro*-inositol로 동정하였다 (Kenny et al., 2014).

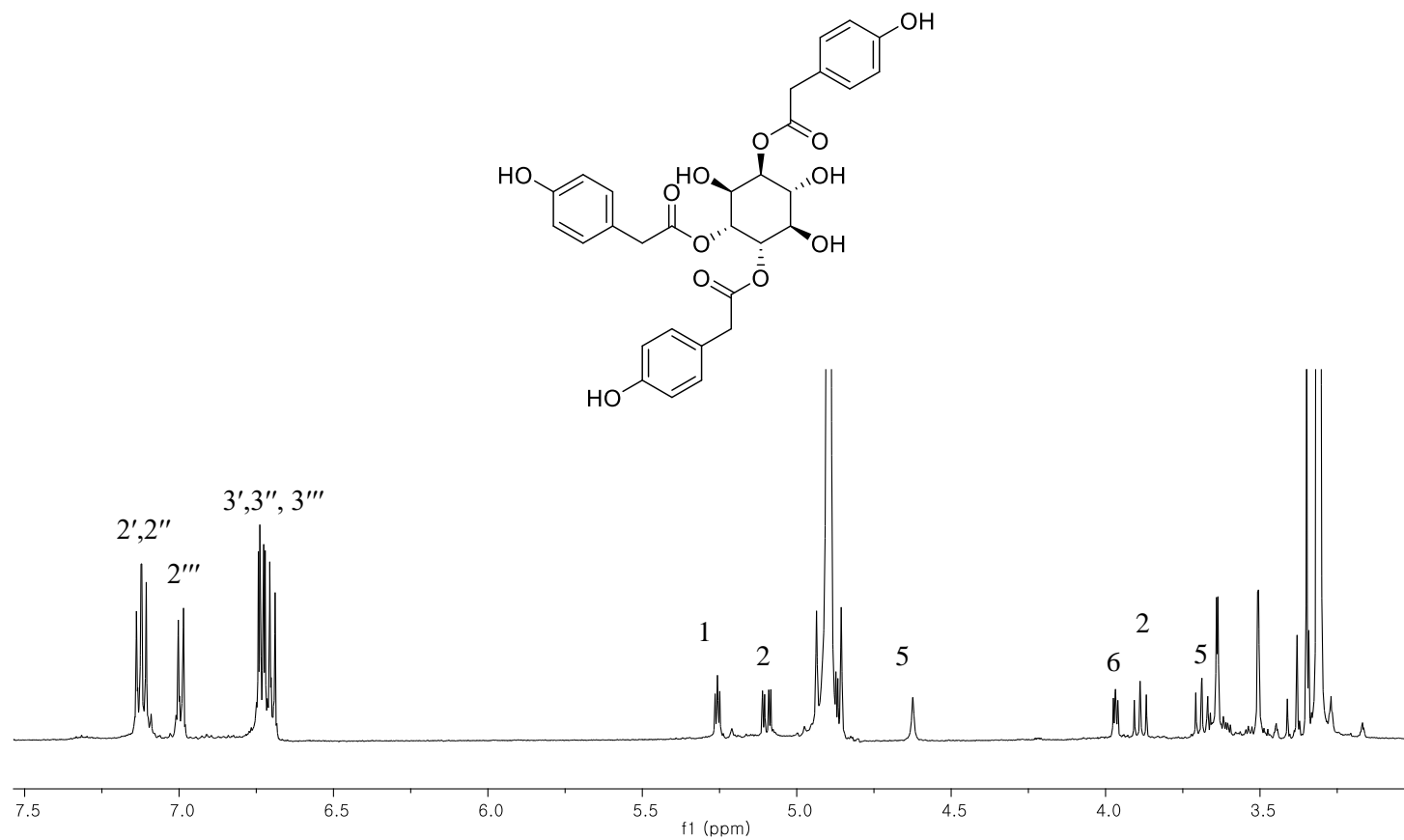


Fig. 52. ^1H -NMR spectrum of compound **10**

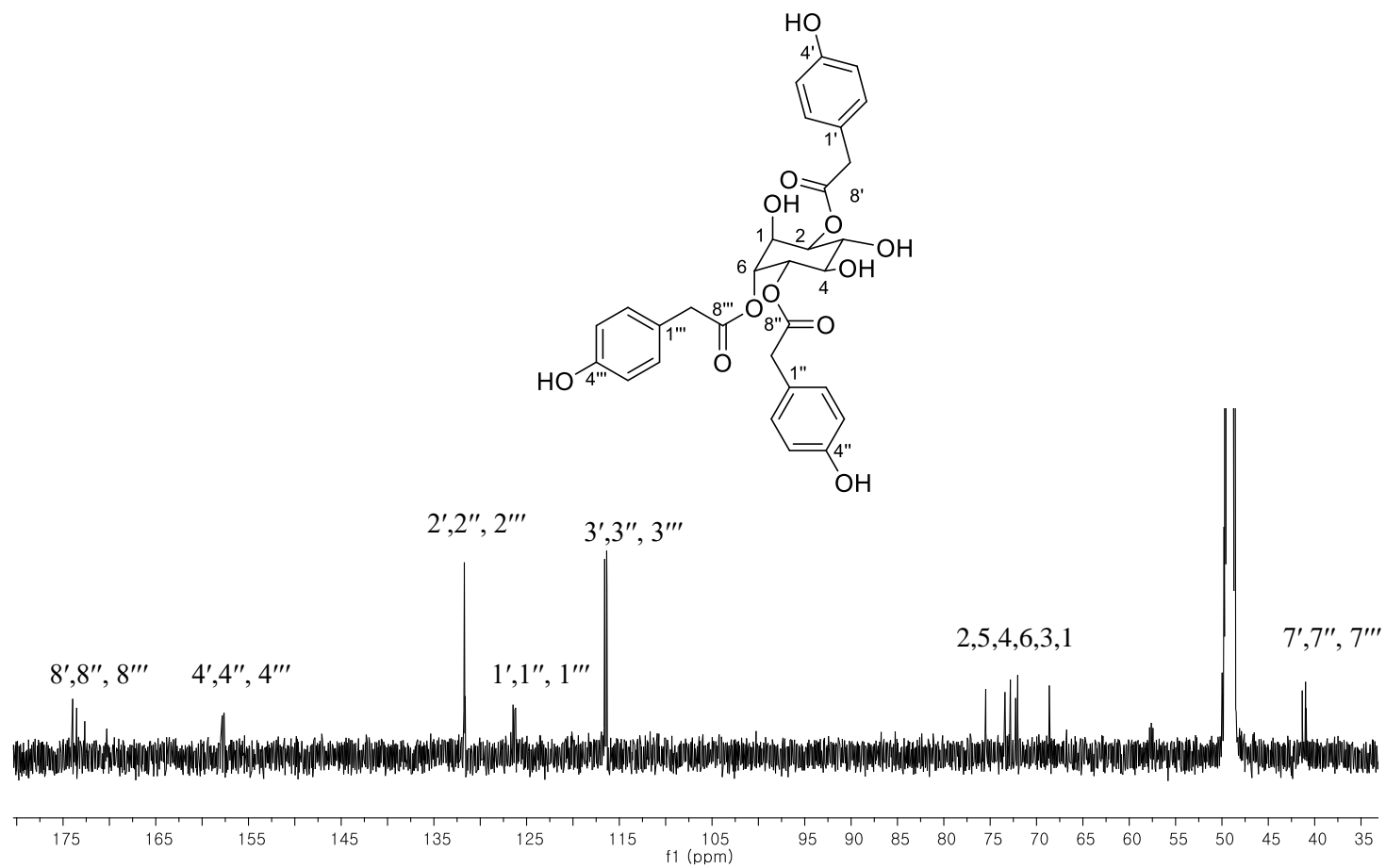


Fig. 53. ^{13}C -NMR spectrum of compound **10**

1.11 화합물 **11**의 구조

무색무정형 화합물 **11**은 분자식이 $C_{21}H_{28}O_9$ 이며 $[m/z\ 605.1658\ [M+Na]^+$ (calcd. for $C_{30}H_{30}O_{12}Na$, 605.1635)], 1D NMR spectra가 화합물 **9**와 거의 유사하다. 1H NMR spectrum에서 세 개의 1,4-치환체 [δ_H 7.13 (2H, d, $J = 8.5$ Hz), 7.11 (2H, d, $J = 8.5$ Hz), 7.11 (2H, d, $J = 8.5$ Hz), 6.74 (2H, d, $J = 8.5$ Hz), 6.73 (2H, d, $J = 8.5$ Hz), 6.67 (2H, d, $J = 8.5$ Hz)], 세 개의 methylene기 [δ_H 3.64 (2H, d, $J = 2.4$ Hz), 3.64 (2H, d, $J = 2.4$ Hz), 3.64 (2H, d, $J = 2.4$ Hz)], 하나의 cyclohexane [δ_H 5.27 (1H, t, $J = 3.7$ Hz), 5.23 (1H, t, $J = 10.4$ Hz), 5.13 (1H, dd, $J = 10.5, 3.3$ Hz), 3.82 (1H, t, $J = 3.7$ Hz), 3.78 (1H, t, $J = 9.6$ Hz), 3.60 (1H, dd, $J = 9.7, 3.1$)]을 동정하였고, ^{13}C NMR spectrum에서 세 개의 aromatic 링 (δ_C 157.8, 157.7, 157.6, 131.7, 131.6, 131.6, 126.9, 126.5, 126.1, 116.6, 116.5, 116.3), 세 개의 carbonyl기 (δ_C 173.2, 172.8, 172.6), 여섯 개의 oxygenated carbon (δ_C 73.9, 72.5, 72.3, 72.0, 71.5, 70.8)과 세 개의 methylene 피크 (δ_C 41.4, 41.3, 40.6)를 확인하였다. Down-field shift된 H-4, H-5, H-6을 통하여 세 개의 4-hydroxyphenylacetyl기가 4, 5, 6번에 연결되어 있는 것을 추정할 수 있고, 문헌과의 비교를 통하여 화합물 **11**을 1D-4,5,6-tri-*O*-4-hydroxyphenylacetyl-*chiro*-inositol로 동정하였다 (Liu et al., 2014).

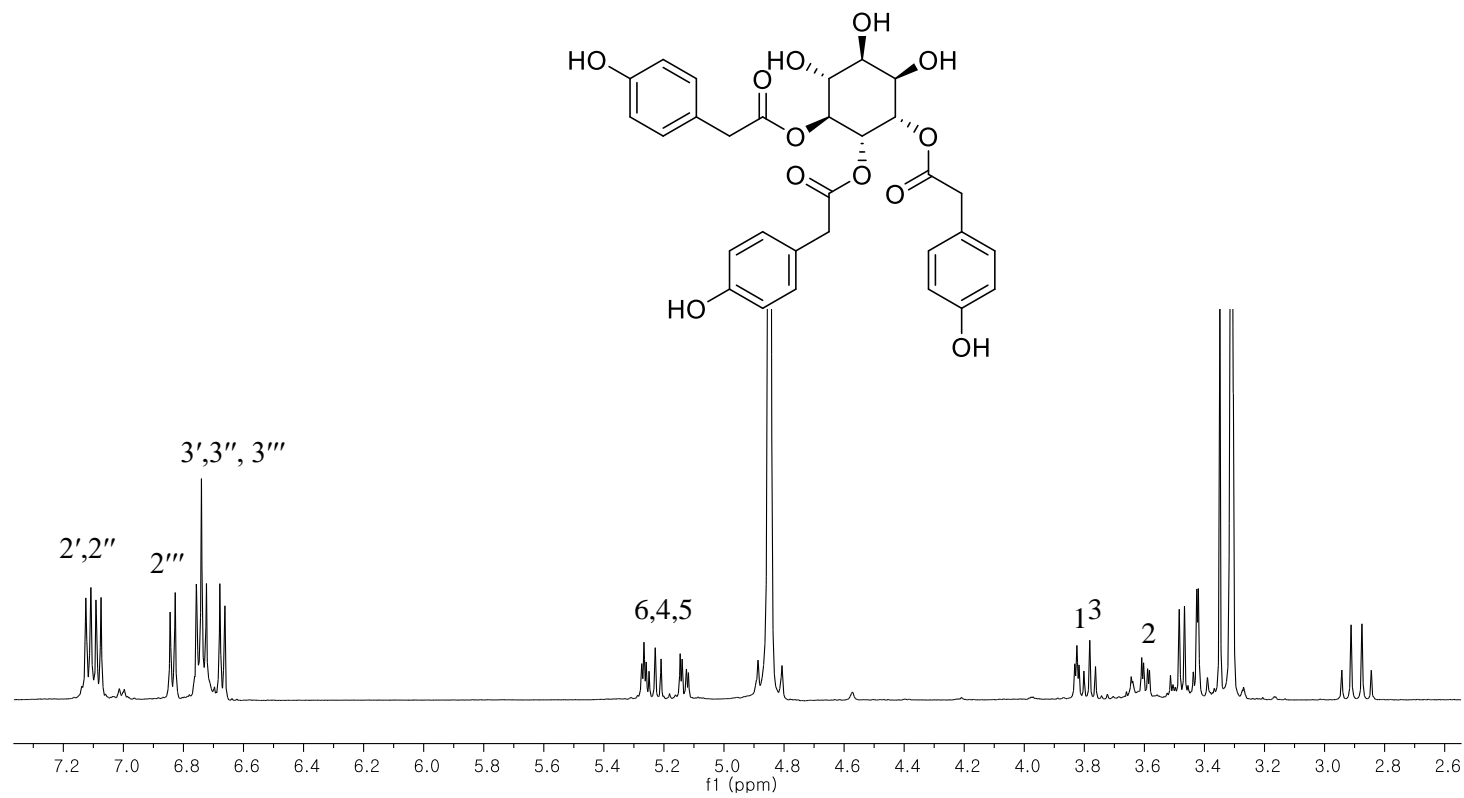


Fig. 54. ^1H -NMR spectrum of compound **11**

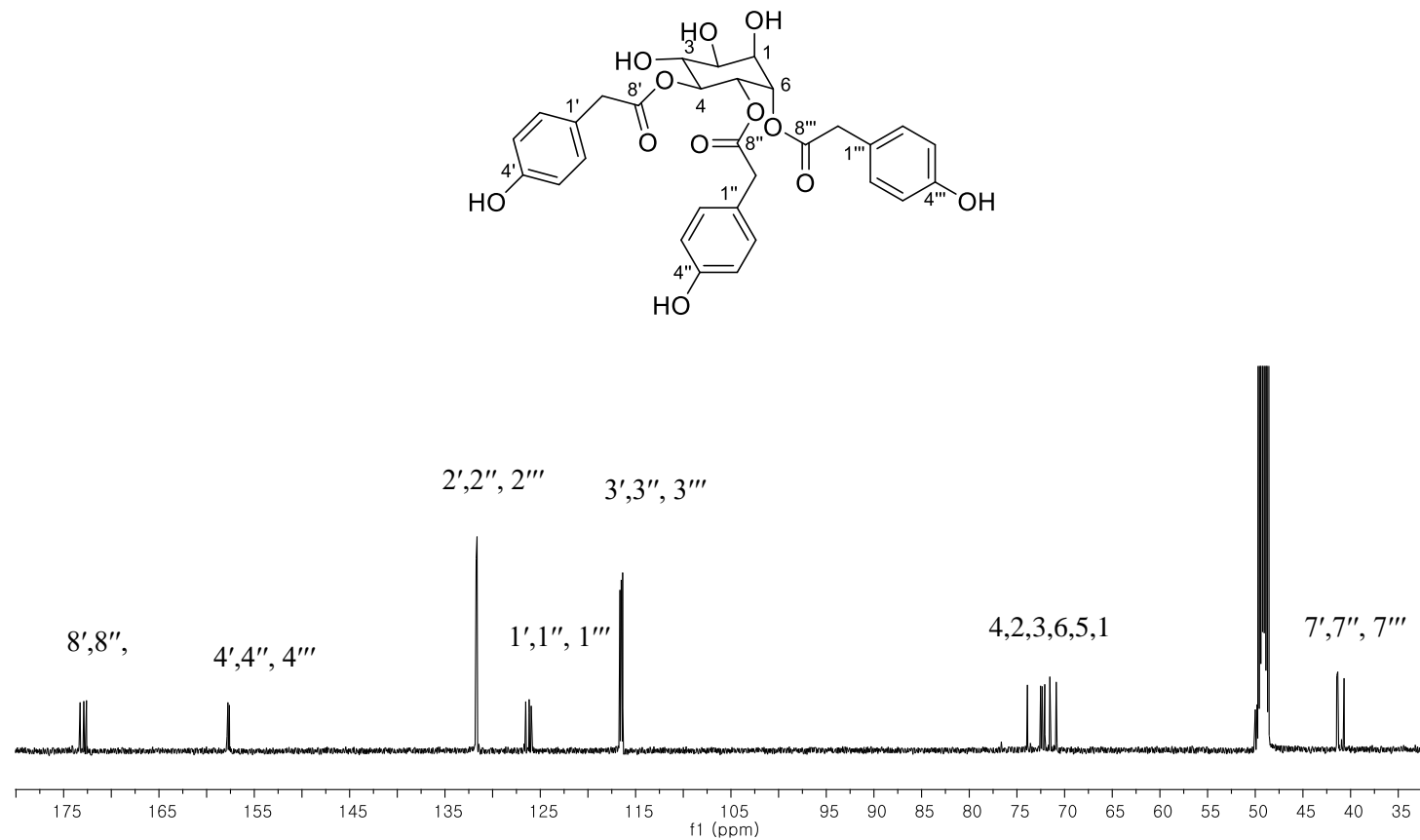


Fig. 55. ^{13}C -NMR spectrum of compound **11**

1.12 화합물 12의 구조

화합물 12는 무색무정형이며 HRESIMS [m/z 471.1285 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{22}H_{24}O_{10}Na$, 471.1267)]에 의해 분자식이 $C_{22}H_{24}O_{10}$ 인 화합물이다. 1H , ^{13}C NMR spectra를 통하여 화합물7과 같이 두 개의 functional group을 갖는 inositol 화합물 구조임을 추정할 수 있다. 1H NMR spectrum를 통해 두 개의 1,4-치환체 [δ_H 7.12 (2H, d, $J = 8.6$ Hz), 7.10 (2H, d, $J = 8.5$ Hz), 6.73 (2H, d, $J = 8.5$ Hz), 6.71 (2H, d, $J = 8.5$ Hz)], 두 개의 methylene기 [δ_H 3.63 (2H, d, $J = 3.6$ Hz), 3.60 (2H, d, $J = 3.2$ Hz)], 하나의 cyclohexane [δ_H 5.14 (1H, t, $J = 3.7$ Hz), 3.91 (1H, dd, $J = 9.8, 3.4$ Hz), 3.56 (1H, t, $J = 9.5$ Hz), 3.82 (1H, t, $J = 9.5$ Hz), 4.81 (1H, dd, $J = 10.2, 3.1$ Hz), 3.98 (1H, t, $J = 3.1$ Hz)]의 존재를 알 수 있으며, ^{13}C NMR spectrum에서 두 개의 aromatic 링 (δ_C 157.6, 157.6, 131.6, 131.6, 126.4, 126.2, 116.4, 116.3), 두 개의 carbonyl기 (δ_C 173.9, 173.3), 여섯 개의 oxygenated carbon (δ_C 75.8, 75.5, 75.1, 72.1, 70.3, 68.3)과 두 개의 methylene 피크(δ_C 41.1, 40.9)을 확인하였다. Down-field shift 된 H-1, H-5를 통하여 연결부위를 추측할 수 있고, 문헌과의 비교를 통하여 화합물 12를 1D-1,5-di-*O*-4-hydroxyphenylacetyl-*chiro*-inositol로 동정하였다 (Liu et al., 2014).

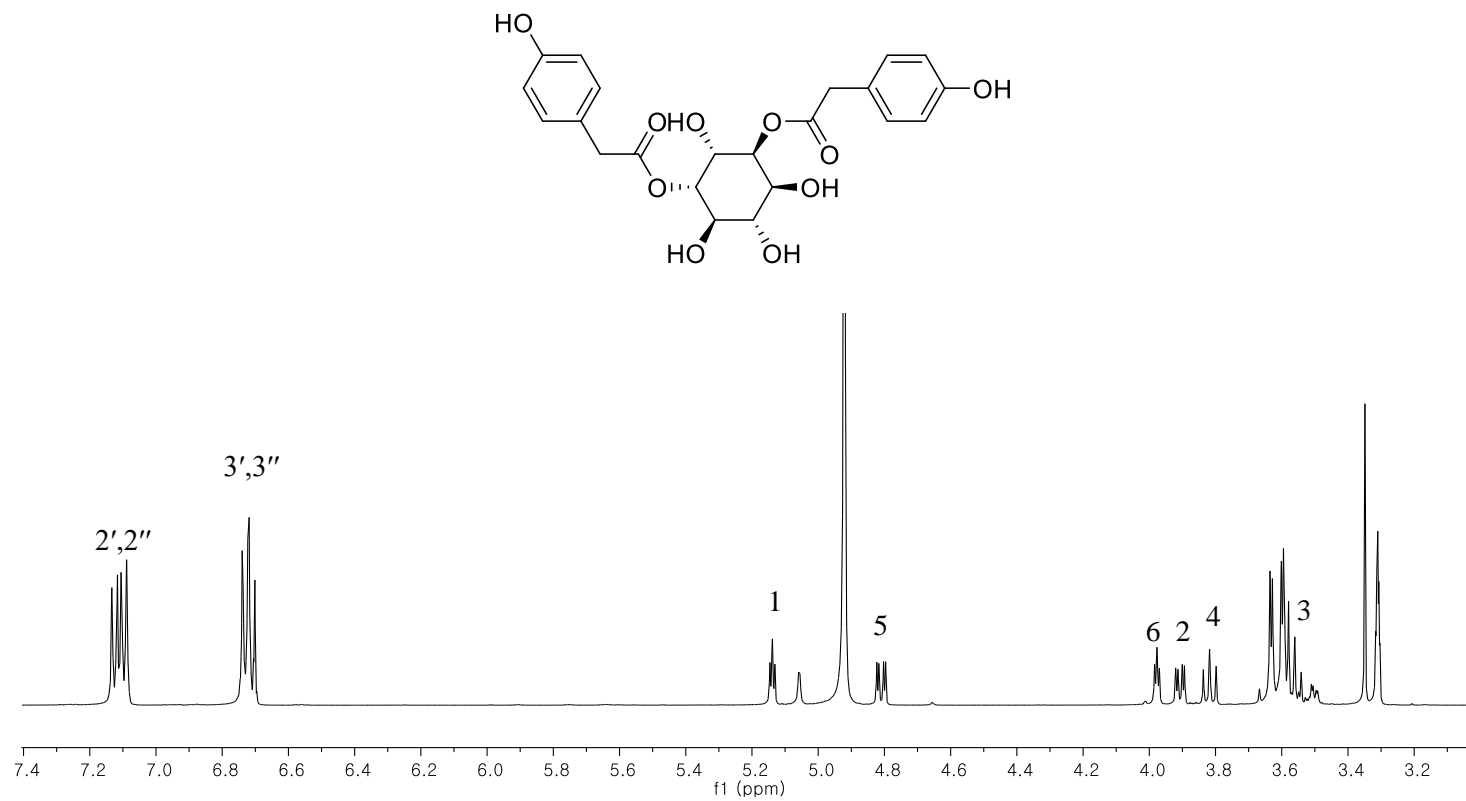


Fig. 56. ^1H -NMR spectrum of compound **12**

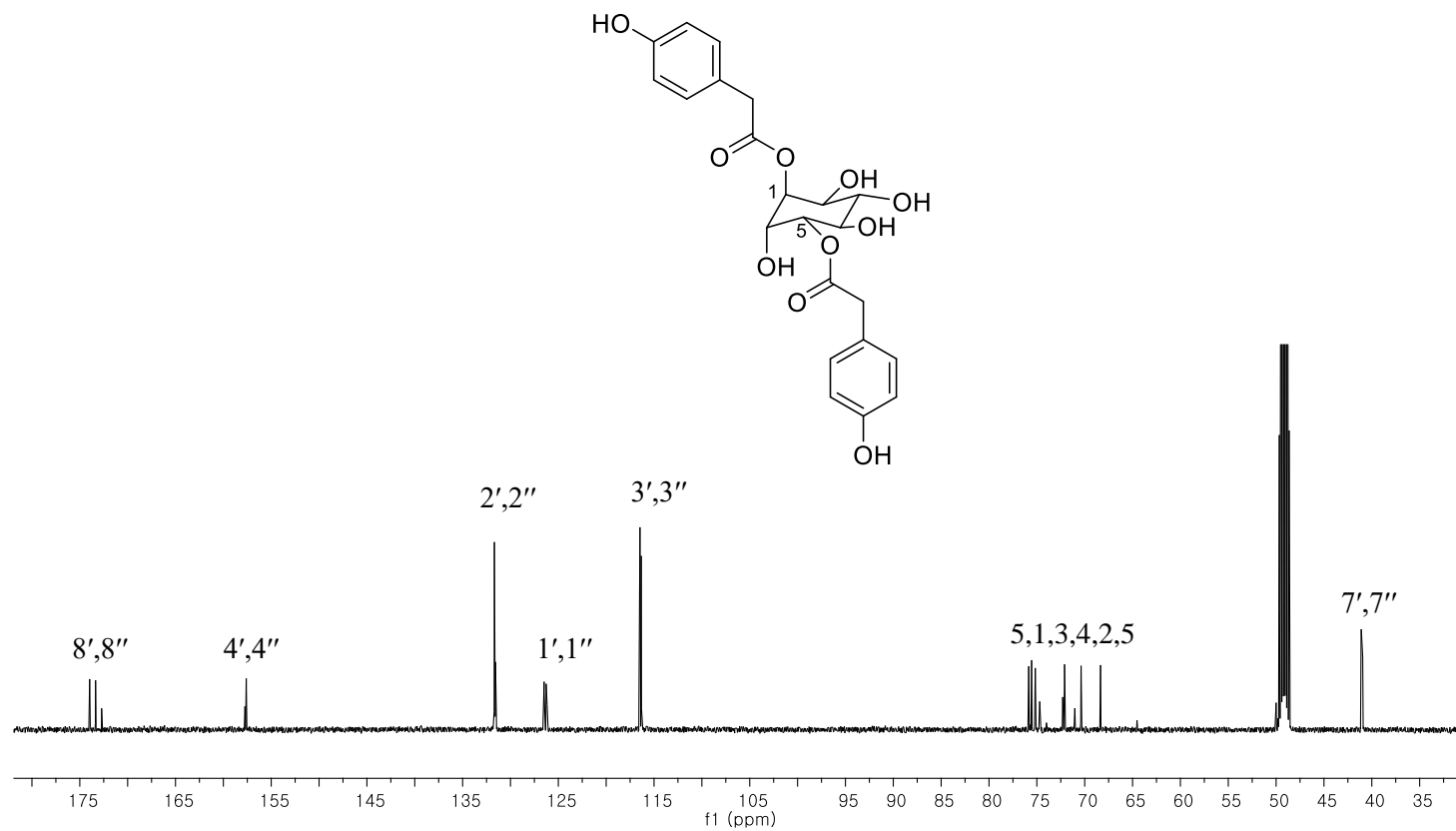


Fig. 57. ^{13}C -NMR spectrum of compound **12**

1.13 화합물 13의 구조

화합물 13은 무색무정형 화합물로서 분자식이 $C_{22}H_{24}O_{10}$ 이다 [m/z 471.1288 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{22}H_{24}O_{10}Na$, 471.1267)]. 1D NMR spectra를 통해 화합물 12와 같이 두 개의 functional group을 갖는 inositol 구조임을 알 수 있으나, 대칭형태를 띄는 것을 추정할 수 있다. 이는 전형적인 *neo*-inositol의 구조이며, 1H NMR spectrum를 통해 두 개의 1,4-치환체 [δ_H 7.12 (2H, d, $J = 8.6$ Hz) $\times 2$, 6.73 (2H, d, $J = 8.5$ Hz) $\times 2$], 두 개의 methylene기 [δ_H 3.63 (2H, d, $J = 3.6$ Hz) $\times 2$], 하나의 cyclohexane [δ_H 5.07 (1H, dd, $J = 9.6$, 2.1 Hz) $\times 2$, 4.01 (1H, d, $J = 1.8$ Hz) $\times 2$, 3.56 (1H, dd, $J = 9.5$, 2.6 Hz) $\times 2$]을 확인할 수 있으며, ^{13}C NMR spectrum에서 두 개의 aromatic 링 (δ_C 157.5 $\times 2$, 131.6 $\times 2$, 126.5 $\times 2$, 116.3 $\times 2$), 두 개의 carbonyl기 (δ_C 174.0 $\times 2$), 여섯 개의 oxygenated carbon (δ_C 75.6 $\times 2$, 72.5 $\times 2$, 71.4 $\times 2$)과 두 개의 methylene 피크 (δ_C 40.9 $\times 2$)을 확인하였다. 이상의 데이터와 문헌치의 비교를 통해 화합물 13을 1,4-di-*O*-4-hydroxyphenylacetyl-*neo*-inositol로 동정하였다 (Kenny et al., 2014).

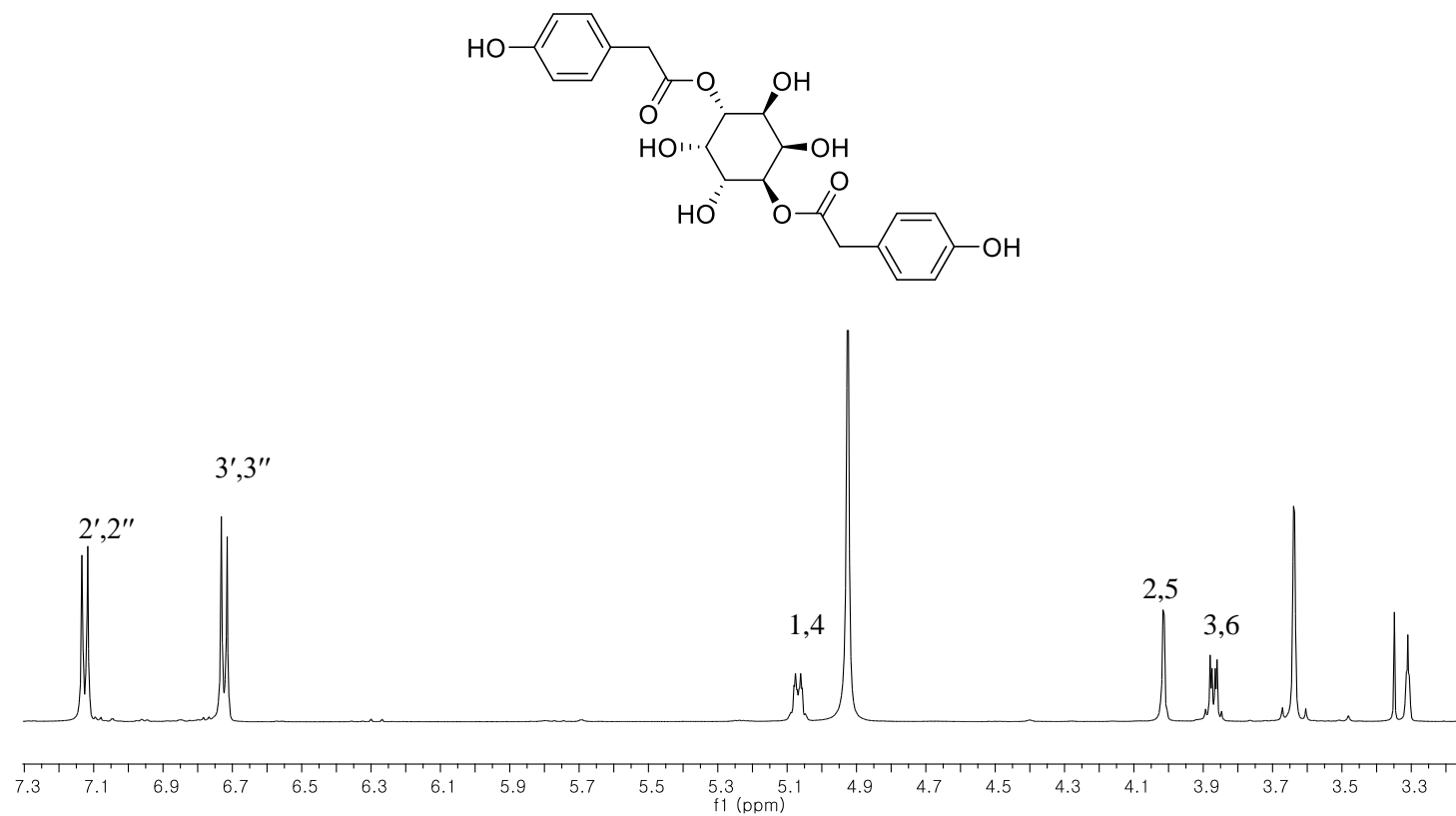


Fig. 58. ^1H -NMR spectrum of compound **13**

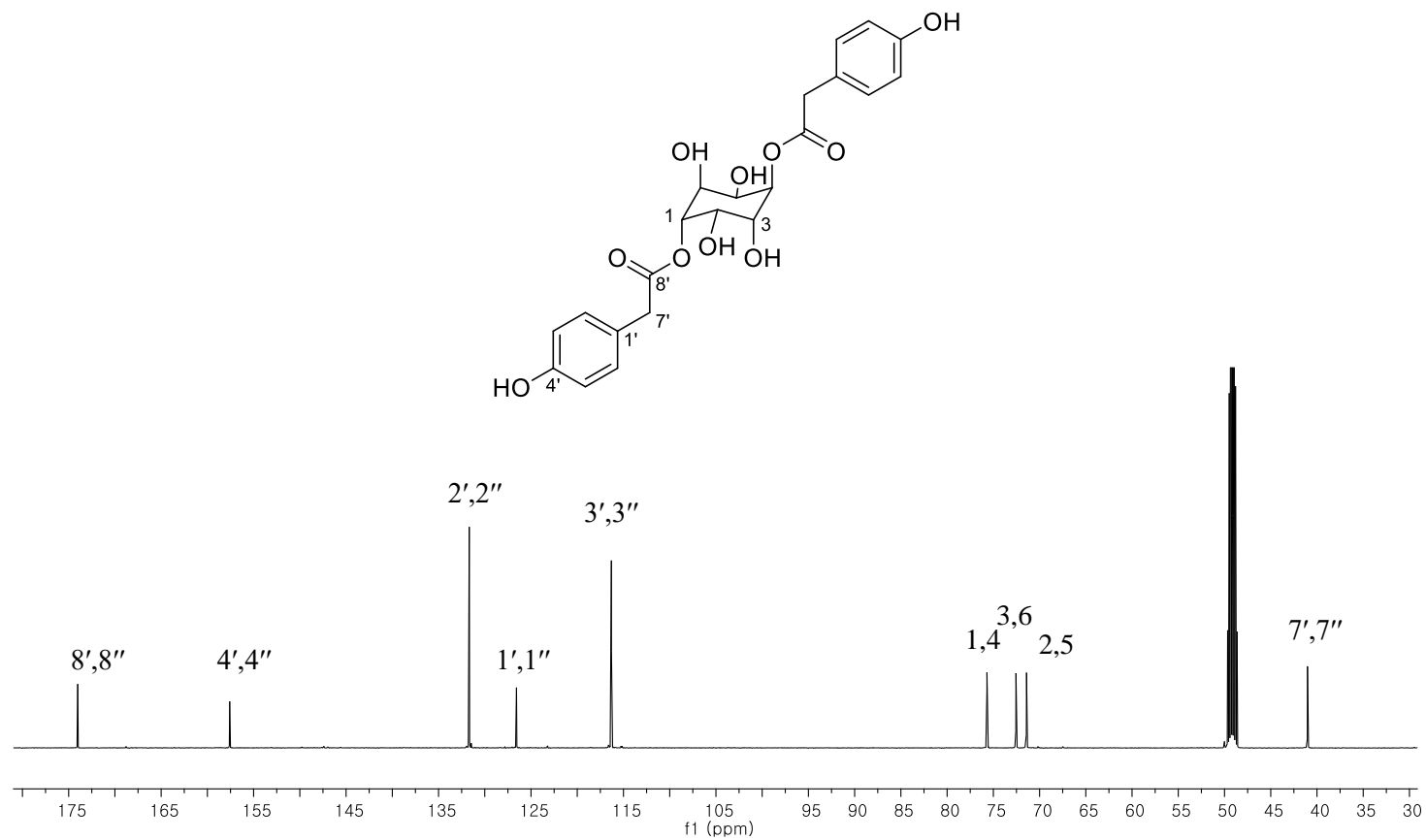


Fig. 59. ^{13}C -NMR spectrum of compound **13**

1.14 화합물 **14**의 구조

무색무정형인 화합물 **14**는 HRESIMS를 통하여 분자식 $C_{22}H_{24}O_{10}$ 을 동정하였다 [m/z 471.1288 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{22}H_{24}O_{10}Na$, 471.1267)]. 1H , ^{13}C NMR spectra를 통해 화합물 **13**과 흡사한 구조를 갖고 있지만, inositol의 입체구조가 다른 것을 알 수 있다. 1H NMR spectrum를 통해 두 개의 1,4-치환체 [δ_H 7.12 (2H, d, $J = 8.5$ Hz), 7.12 (2H, d, $J = 8.5$ Hz), 6.73 (2H, d, $J = 8.5$ Hz), 6.71 (2H, d, $J = 8.5$ Hz)], 두 개의 methylene기 [δ_H 3.63 (2H, d, $J = 3.6$ Hz), 3.60 (2H, overlap)], 하나의 cyclohexane [δ_H 5.10 (1H, t, $J = 9.5$ Hz), 5.14 (1H, t, $J = 3.3$ Hz), 3.94 (1H, dd, $J = 10.0, 3.0$ Hz), 3.80 (1H, t, $J = 3.3$ Hz), 3.60 (1H, overlap), 3.49 (1H, dd, $J = 10.0, 2.7$ Hz)]을 확인하였고, ^{13}C NMR spectrum에서 두 개의 aromatic 링 (δ_C 157.6, 157.6, 131.6, 131.6, 126.4, 126.2, 116.4, 116.3), 두 개의 carbonyl기 (δ_C 173.9, 173.3), 여섯 개의 oxygenated carbon (δ_C 76.9, 75.5, 73.1, 71.0, 70.8, 70.5)과 두 개의 methylene 피크 (δ_C 41.1, 40.9)을 확인하였다. Coupling constant를 통한 입체구조를 동정하였고, 문헌치와의 비교를 통해 화합물 **14**를 1D-1,4-di-*O*-4-hydroxyphenylacetyl-*chiro*-inositol로 동정하였다 (Kenny et al., 2014).

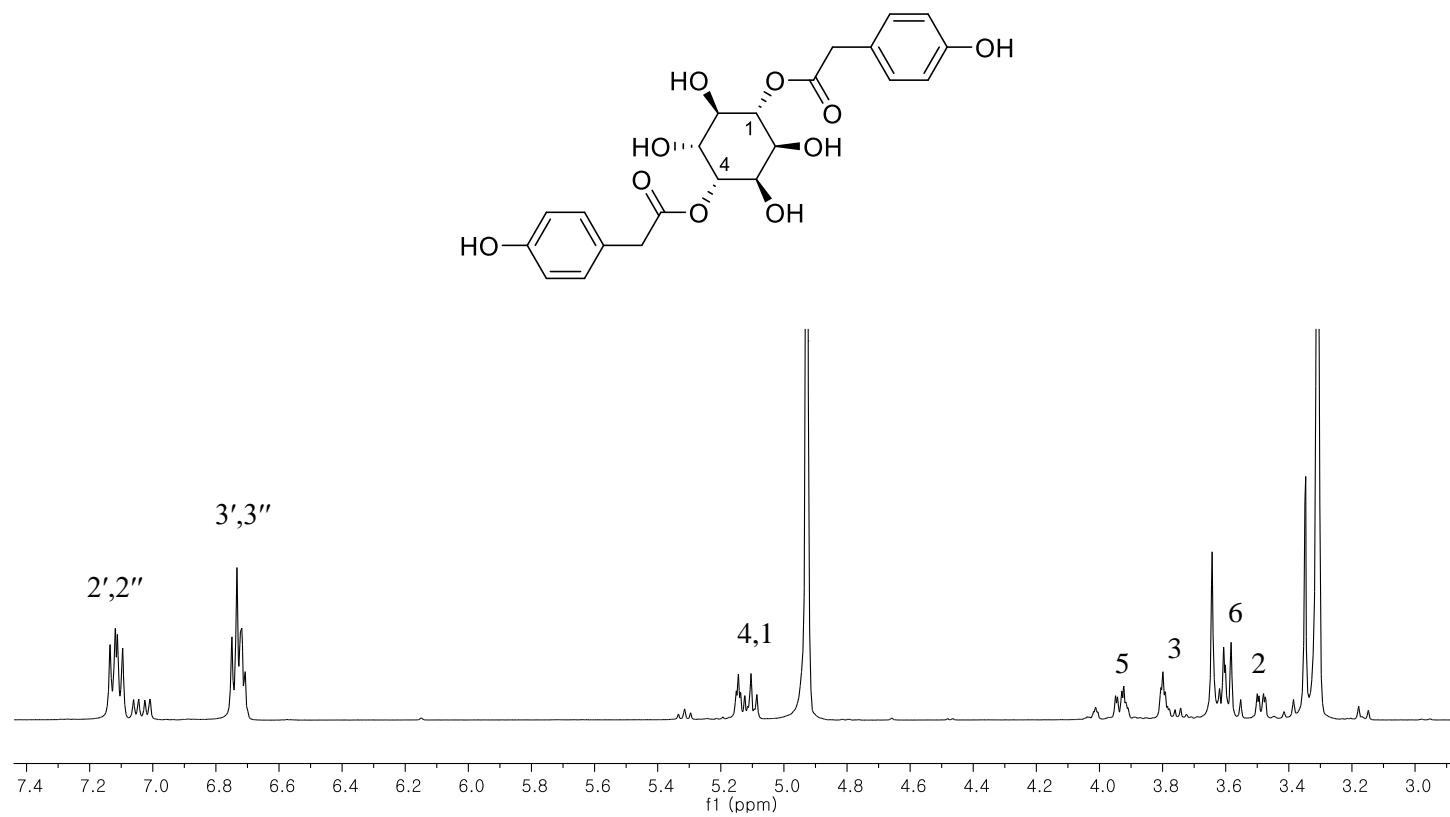


Fig. 60. ^1H -NMR spectrum of compound **14**

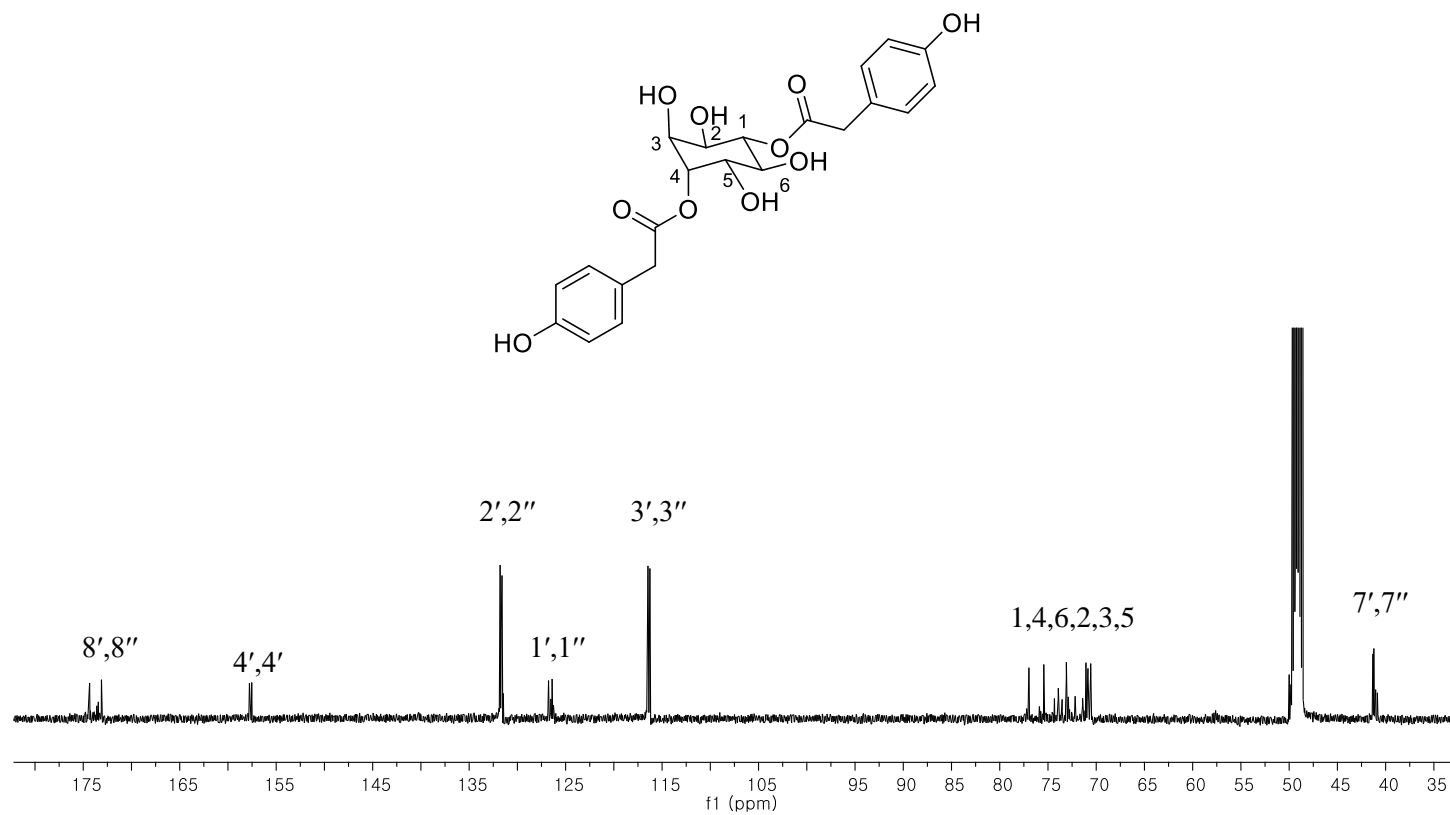


Fig. 61. ^{13}C -NMR spectrum of compound **14**

1.15 화합물 **15**의 구조

화합물 **15**번은 황색무정형 분말로 HRESIMS 값 [m/z 564.2091 $[M+H]^+$ (calcd. for $C_{27}H_{34}NO_{12}$, 564.2081)]을 통해 분자식 $C_{27}H_{33}NO_{12}$ 을 구하였다. 1H NMR spectrum에서 하나의 1,4-치환체와 하나의 aromatic signal [δ_H 7.06 (2H, d, $J = 8.5$ Hz), 6.67 (2H, d, $J = 8.5$ Hz), 6.32 (1H, s)], anomeric 피크 [δ_H 5.02 (1H, d, $J = 7.6$ Hz)], amino group [δ_H 4.37 (2H, s)], 5개 methylene 피크 [δ_H 2.86 (2H, t, $J = 10.8$ Hz), 3.42 (2H, m), 2.40 (1H, m), 2.16 (1H, m), 2.07 (1H, m), 1.91 (1H, m), 3.64 (1H, m), 3.21 (1H, m)]가 확인되었다. ^{13}C NMR spectrum에서는 하나의 ketone기 (δ_C 206.6), 하나의 carbonyl기 (δ_C 173.7), 2개의 aromatic ring (δ_C 167.7, 166.0, 162.4, 156.5, 134.0, 130.5, 116.2, 106.8, 98.4, 95.5), 당 하나 (δ_C 102.1, 78.6, 78.5, 74.8, 71.1, 62.5), 3개의 amino carbon (δ_C 69.8, 55.4, 48.4), 4개의 methylene 피크 (δ_C 47.1, 30.9, 30.3, 24.9)를 확인할 수 있다. COSY (H-7/H-8)와 HMBC (H-2/C-7, H-7/C-9, H-3'/C-1', C-2', C-4', C-5', H-1''/C-2) correlation 을 통해 chalcone 골격의 구조인 'phlorizin'의 존재를 추정 할 수 있다. 또한 COSY (H-3'''-4'''-5'''-6''')와 HMBC (H-1'''/C-3''', 6''', H-3'''/C-7''') correlation을 통해 부분구조 methylproline 구조를 동정할 수 있다. HMBC correlation H-1'''/C-4'와 C-6'를 통해 methylproline이 phlorizin 5' 위치에 결합되어 있음을 알 수 있다. 이상의 결과로 화합물 **15**를 5'-methylproline phlorizin으로 동정하였다.

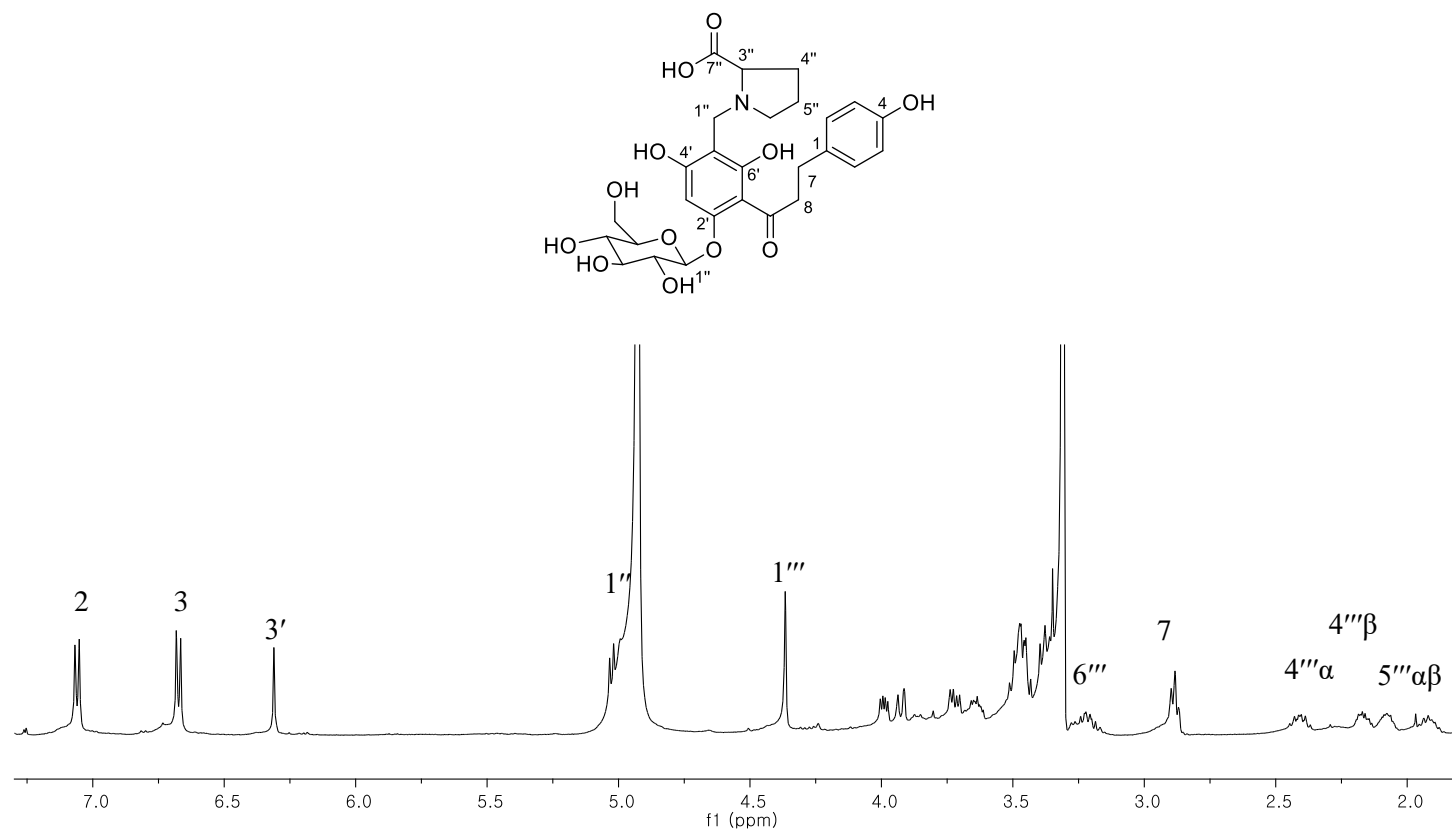


Fig. 62. ^1H -NMR spectrum of compound **15**

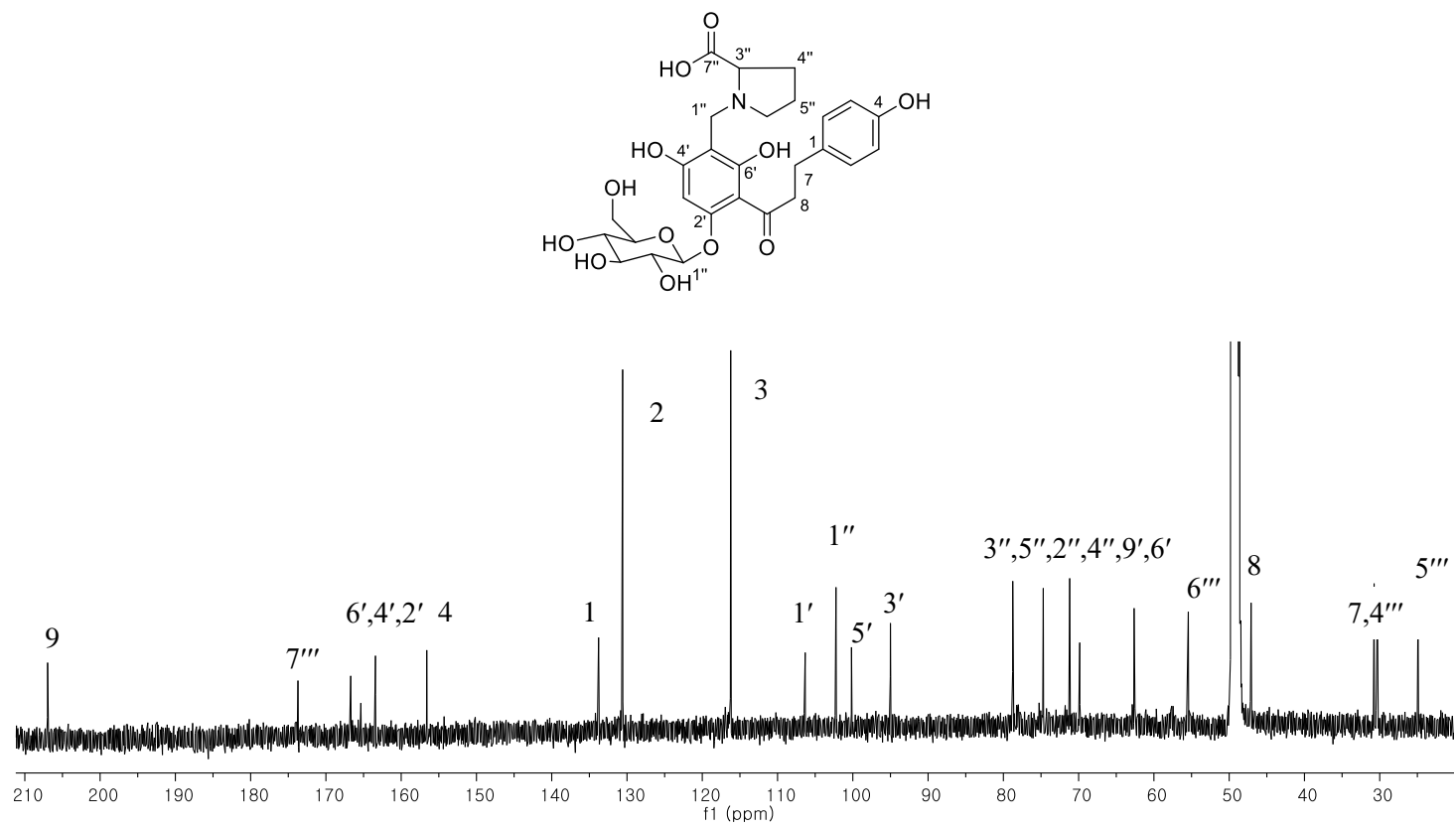


Fig. 63. ^{13}C -NMR spectrum of compound **15**

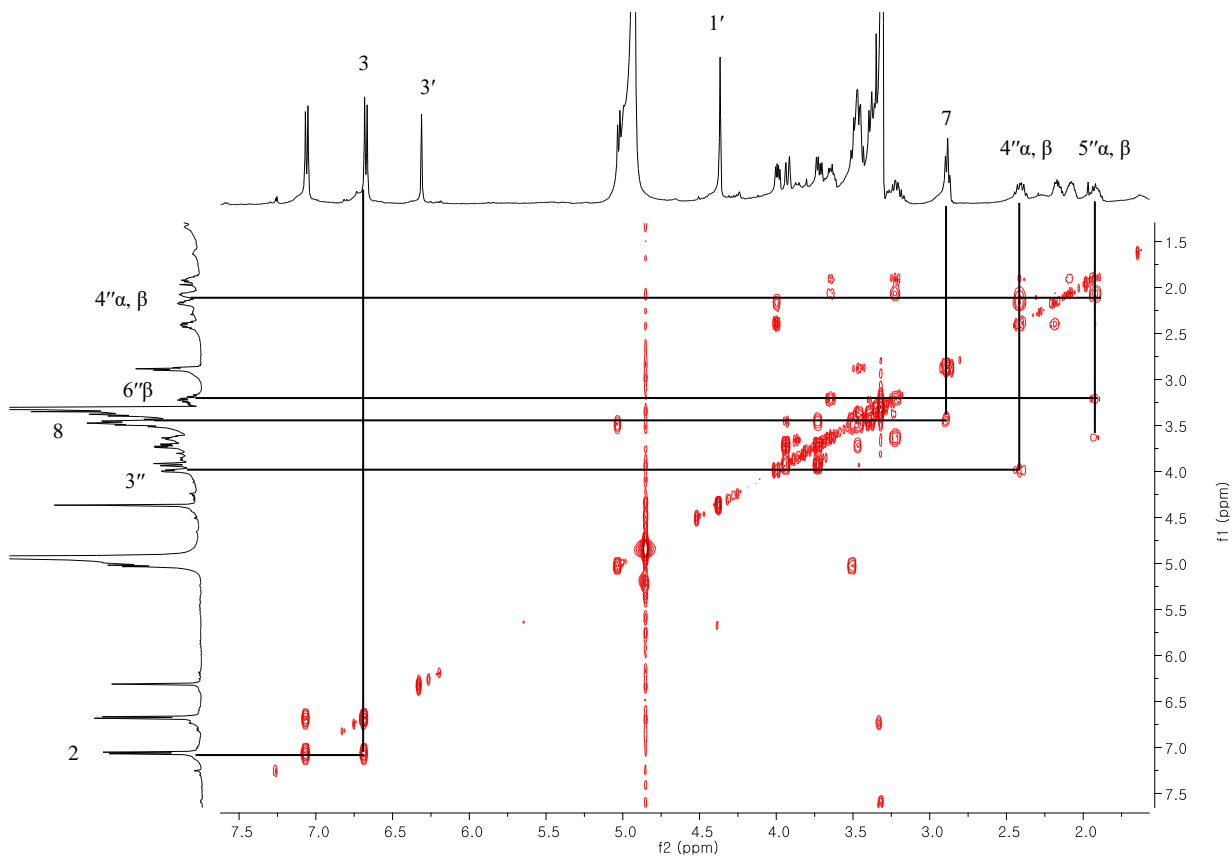


Fig. 64. ^1H - ^1H COSY spectrum of compound **15**

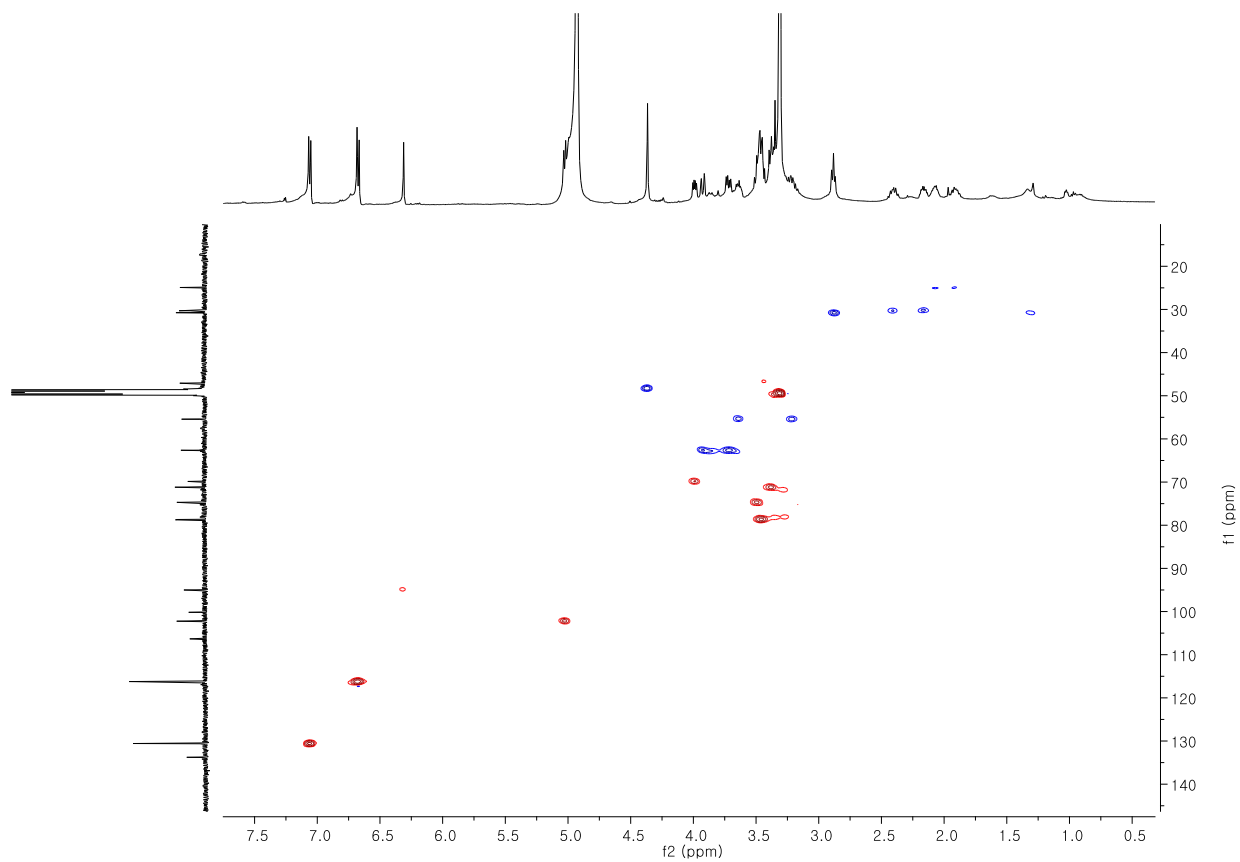


Fig. 65. HSQC spectrum of compound **15**

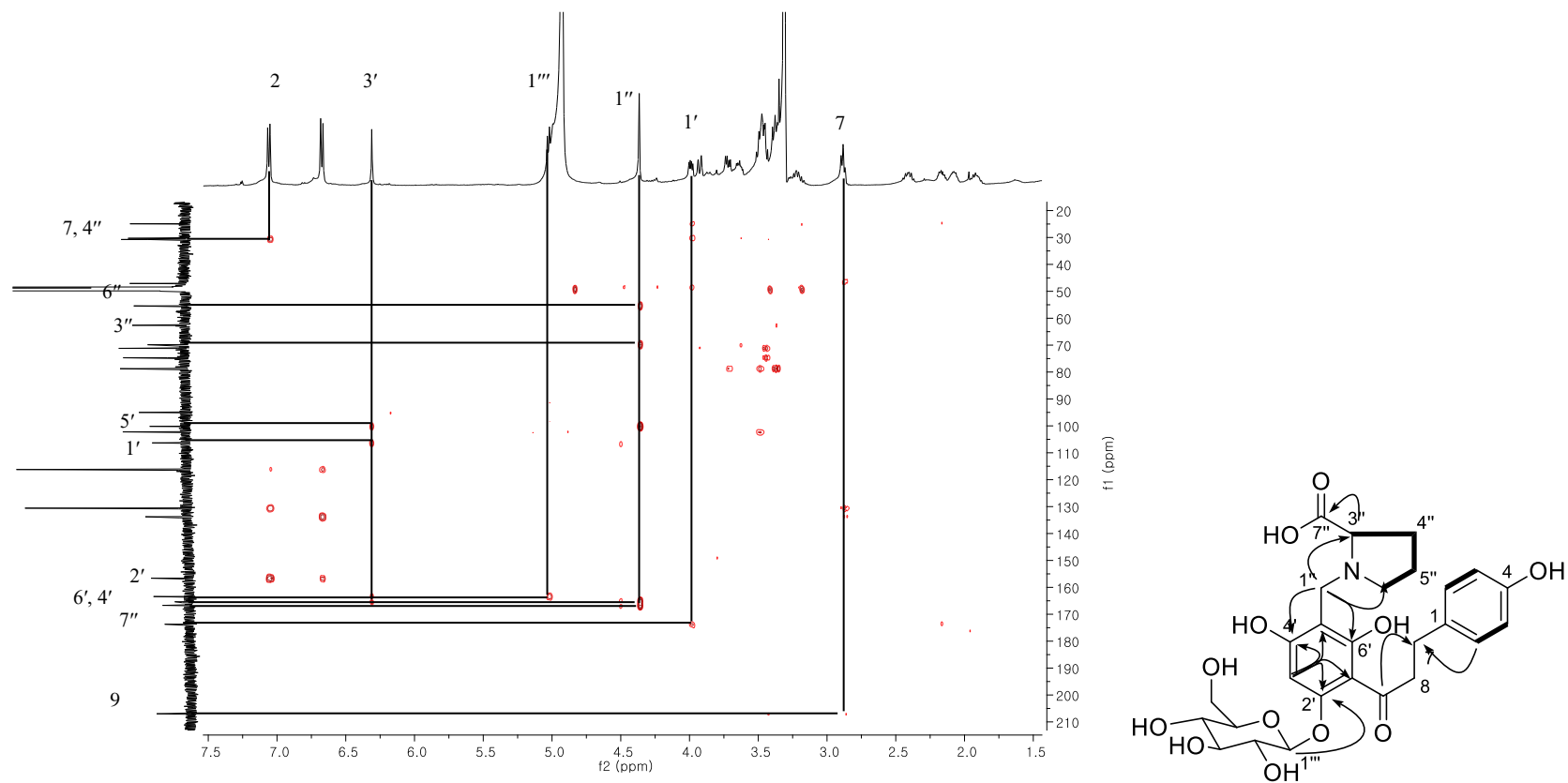


Fig. 66. HMBC spectrum of compound **15**

1.16 화합물 16, 17, 18, 19의 구조

황색무정형 분말인 화합물 16은 분자식이 $C_{16}H_{12}O_6$ 이다 [m/z 299.0567 $[M-H]^-$ (calcd. for $C_{16}H_{11}O_6$, 299.0556)]. 1H NMR spectrum에서 1,3,4-치환체 [δ_H 7.57 (1H, d, $J = 8.9$ Hz), 7.56 (1H, s), 6.93 (1H, dd, $J = 8.9, 2.1$ Hz)], 두 개의 *meta*-coupling proton [δ_H 6.51 (1H, s), 6.19 (1H, s)], 하나의 singlet 피크 [δ_H 6.91 (1H, s)] 그리고 methoxyl기 [δ_H 3.89 (3H, s)]를 확인할 수 있으며, 이를 토대로 하나의 methoxyl기를 갖는 플라보노이드 구조임을 추정할 수 있다. ^{13}C NMR spectrum과 문헌치와의 비교를 통해 화합물 16을 chrysoeriol로 동정하였다 (Ribeiro et al., 2013).

화합물 17 역시 황색무정형 화합물이며 MS 값 [m/z 329.0677 $[M-H]^-$ (calcd. for $C_{17}H_{13}O_7$, 329.0661)]을 통해 분자식 $C_{17}H_{14}O_7$ 을 얻었다. 1H NMR spectrum에서 δ_H 7.16 (2H, s), δ_H 6.92 (1H, s), 6.48 (1H, d, $J = 2.0$ Hz), 6.21 (1H, d, $J = 2.0$ Hz)와 두 개의 methoxyl기 (δ_H 3.88, 3.75)를 통해 두 개의 methoxyl기를 갖는 tricetin 구조를 추정할 수 있다. ^{13}C NMR spectrum과 문헌치와의 비교를 통해 화합물 17을 5,7,3'-hydroxy-4',5'-dimethoxy flavone로 동정하였다 (Rofi and Pomilio, 1985).

플라보노이드 화합물 18은 황색무정형 화합물이며 HRESIMS [m/z 353.0635 (calcd. for $C_{17}H_{14}O_7Na$, 353.0637)]를 통하여 분자식 $C_{17}H_{14}O_7$ 을 얻었다. 1H , ^{13}C NMR spectra가 화합물 17과 거의 유사한 것으로 보인다. 차이점이 있다면 두 개의 methoxyl기가 대칭으로 존재하는 것인데,

^1H NMR spectrum에서 δ_{H} 7.34 (2H, s), δ_{H} 7.00 (1H, s), 6.58 (1H, s), 6.22 (1H, s) 와 3.90 (3H, s) $\times 2$ 를 통해 tricetin에 3', 5'위치에 methoxyl기가 있는 것으로 추정할 수 있다. 이를 토대로 문헌치와 비교를 통하여 화합물 **18**을 5,7,4'-hydroxy-3',5'-dimethoxy flavone로 동정하였다 (Dong et al., 2011).

화합물 **19**는 황색무정형 화합물이며 HRESIMS 값 [m/z 285.0411 [M-H]⁻ (calcd. for $\text{C}_{15}\text{H}_9\text{O}_6$, 285.0399)]을 통해 분자식 $\text{C}_{15}\text{H}_{10}\text{O}_7$ 을 구하였다. NMR spectra가 화합물 **16**과 유사하나, ^1H NMR spectrum에서 δ_{H} 7.41 (1H, dd, $J = 8.4, 2.3$ Hz), 7.41 (1H, d, $J = 8.4$ Hz), 7.40 (1H, s), 6.66 (1H, s), 6.44 (1H, d, $J = 2.1$ Hz), 6.18 (1H, d, $J = 2.1$ Hz)을 통해 methoxyl기가 없다는 것을 발견할 수 있다. 문헌과의 비교를 통해 화합물 **19**가 luteolin 인 것을 알 수 있다 (Chaturvedula and Prakash, 2013).

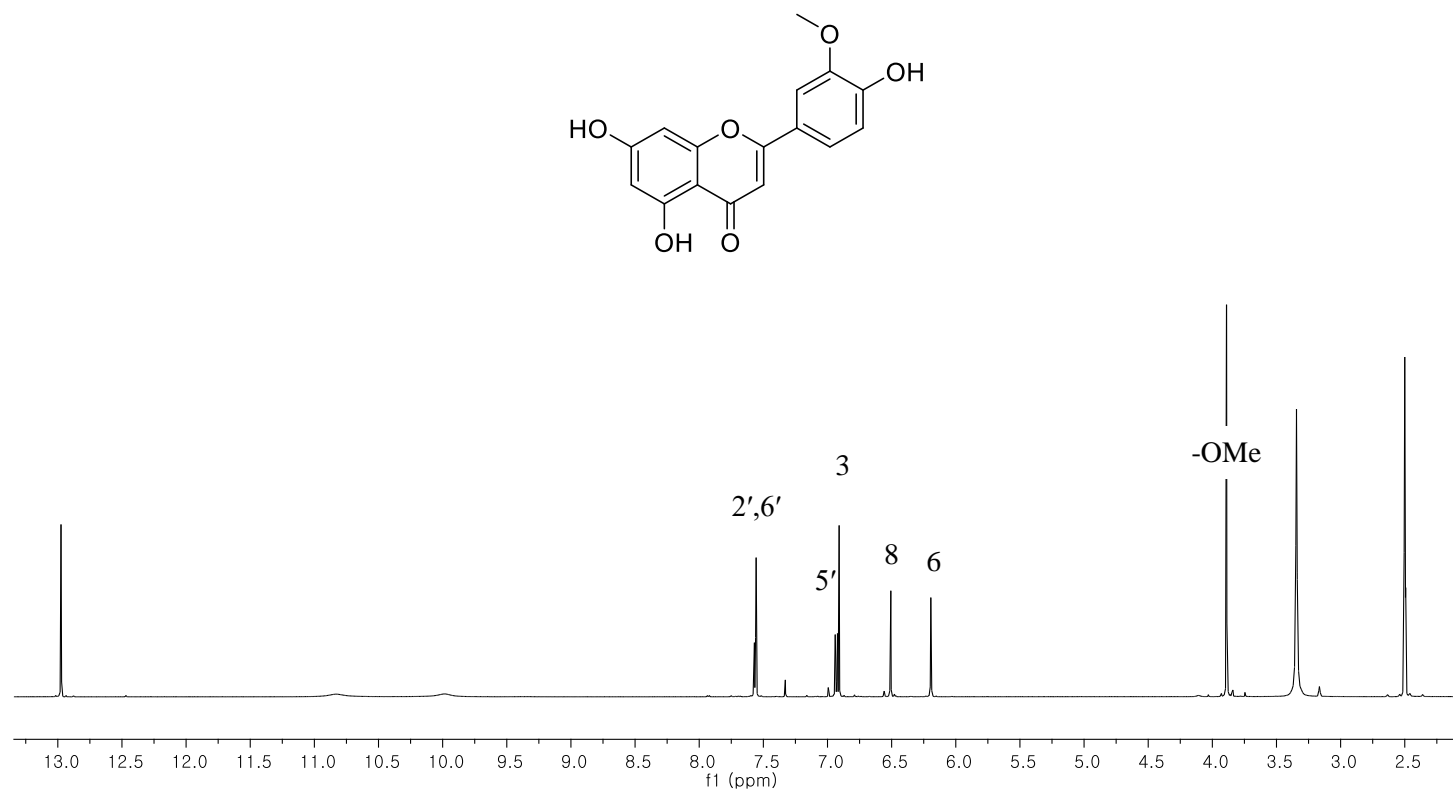


Fig. 67. ^1H -NMR spectrum of compound **16**

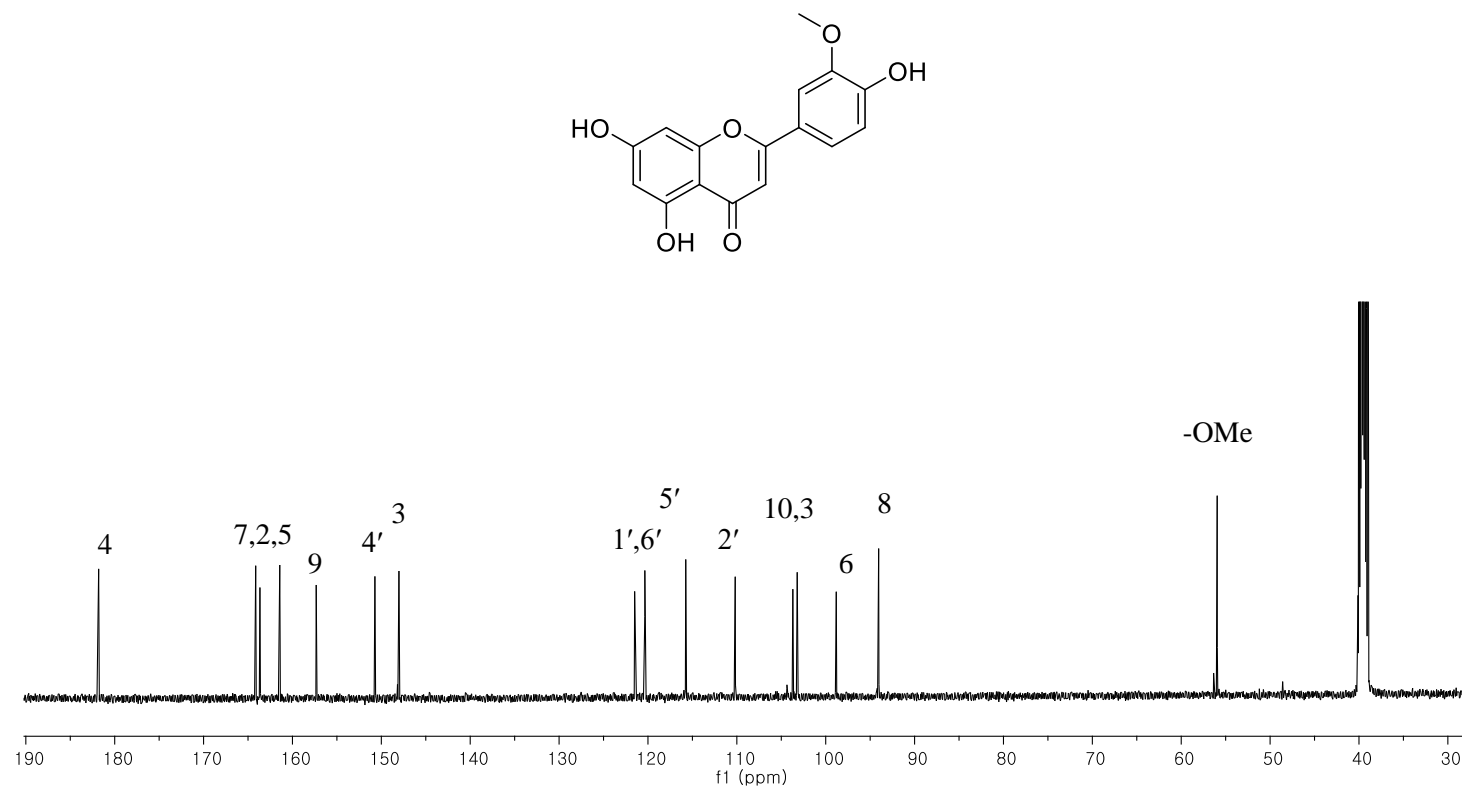


Fig. 68. ^{13}C -NMR spectrum of compound **16**

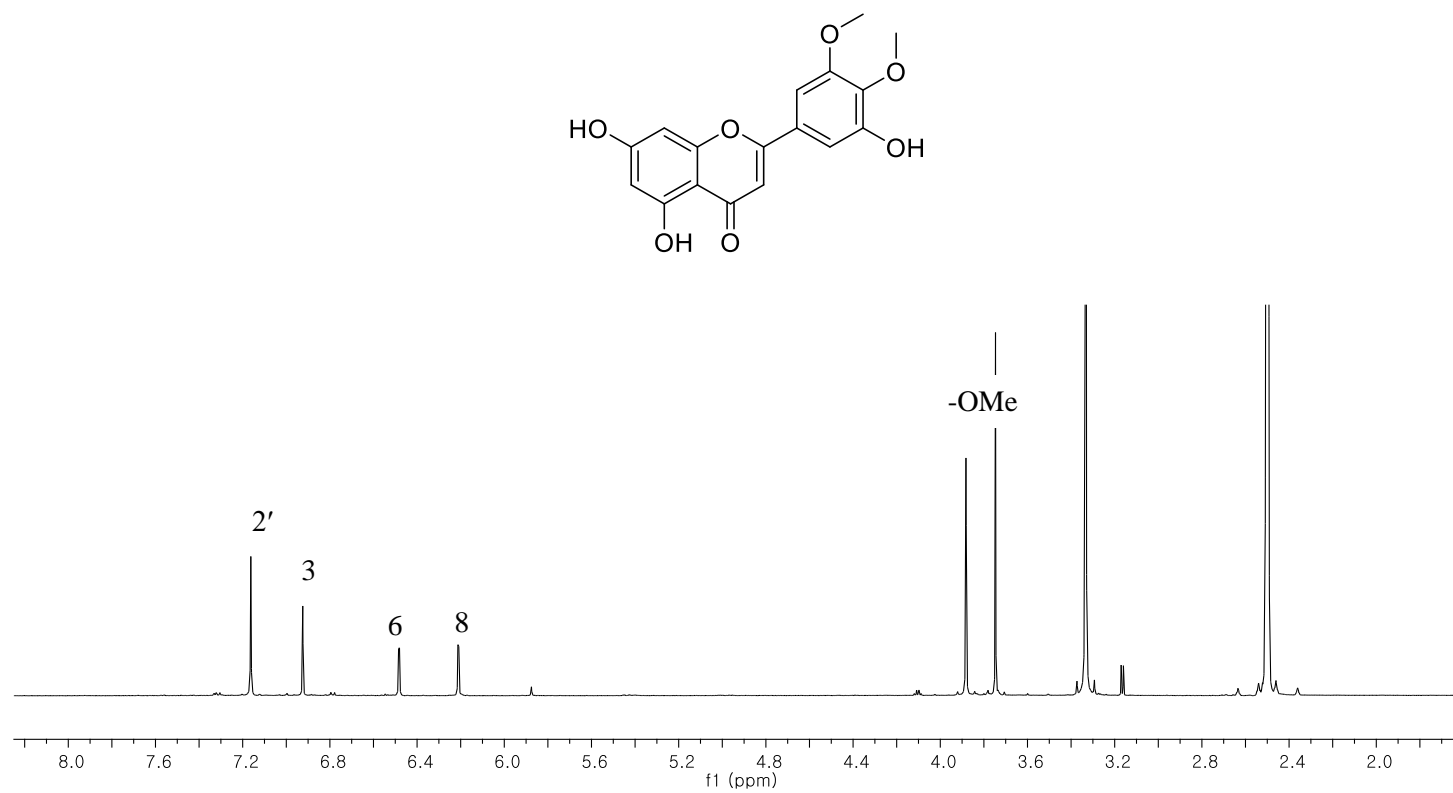


Fig. 69. ^1H -NMR spectrum of compound **17**

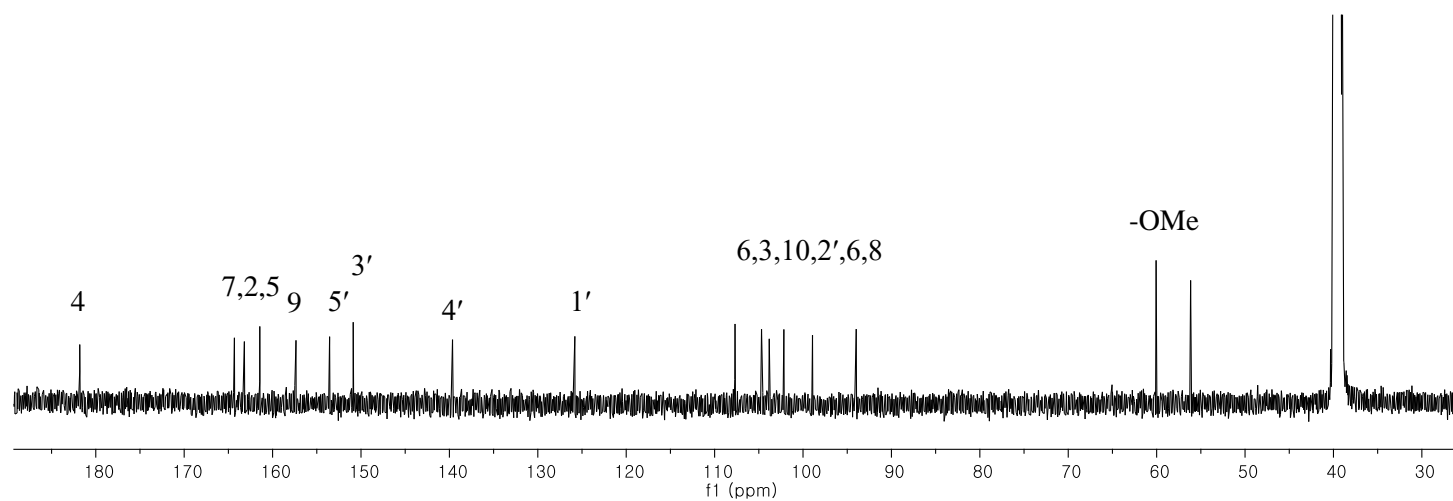
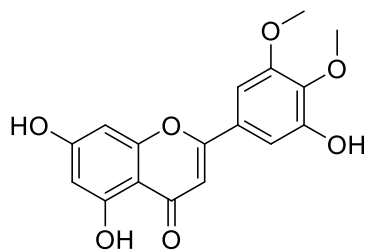


Fig. 70. ^{13}C -NMR spectrum of compound **17**

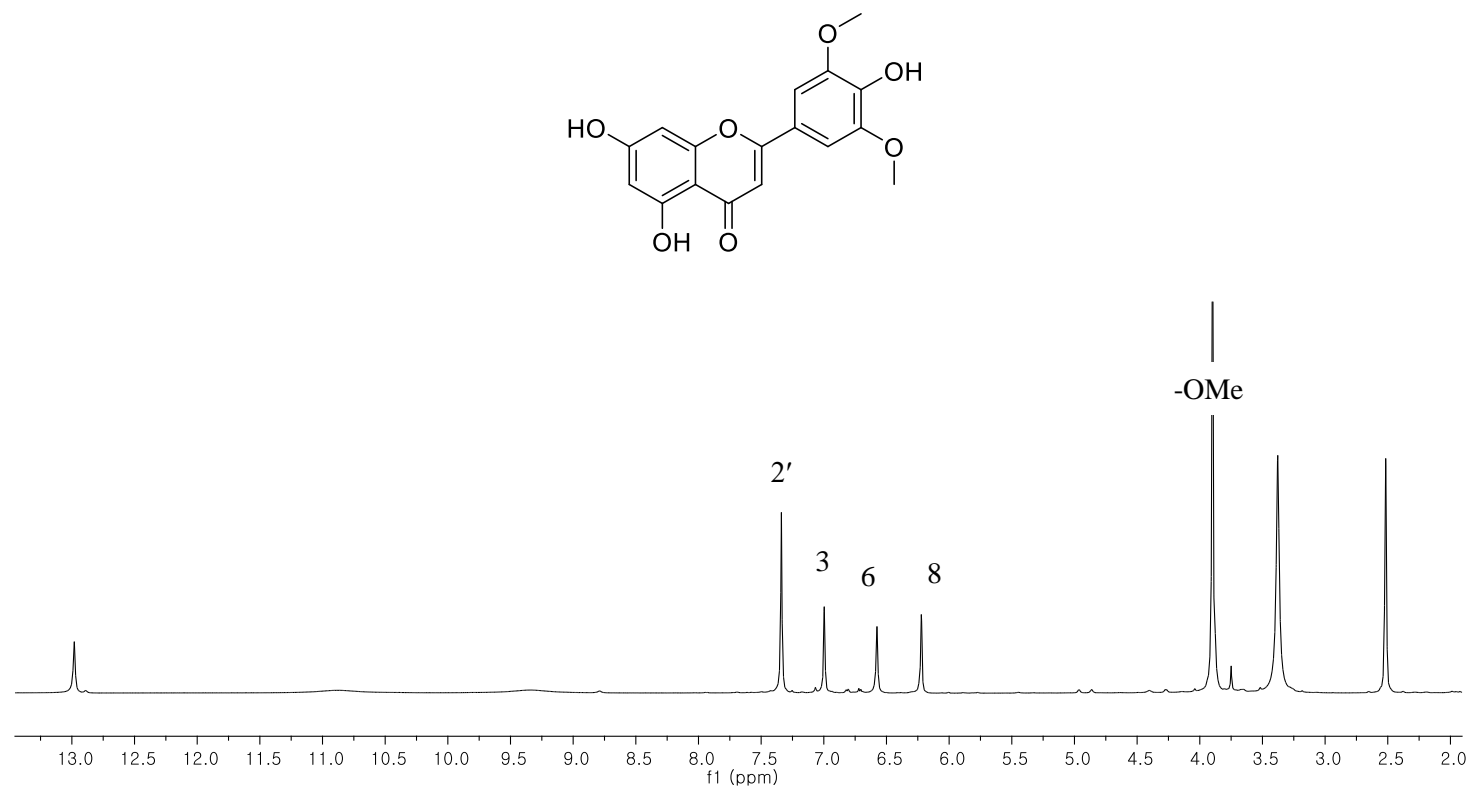


Fig. 71. ^1H -NMR spectrum of compound **18**

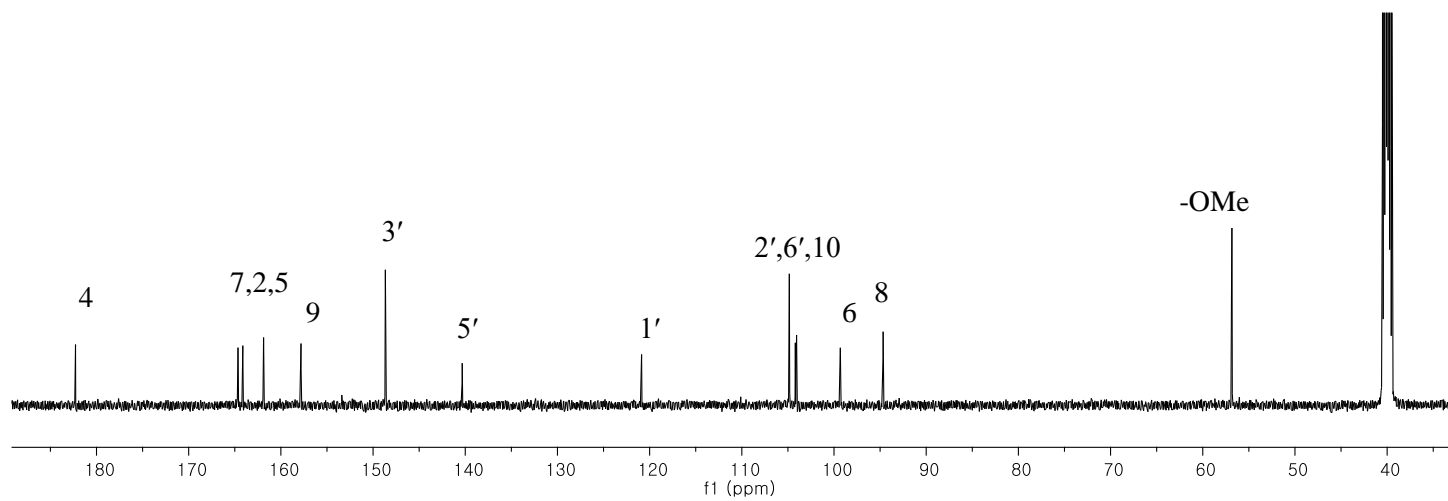
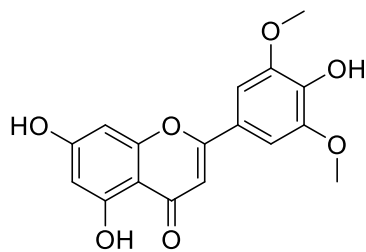
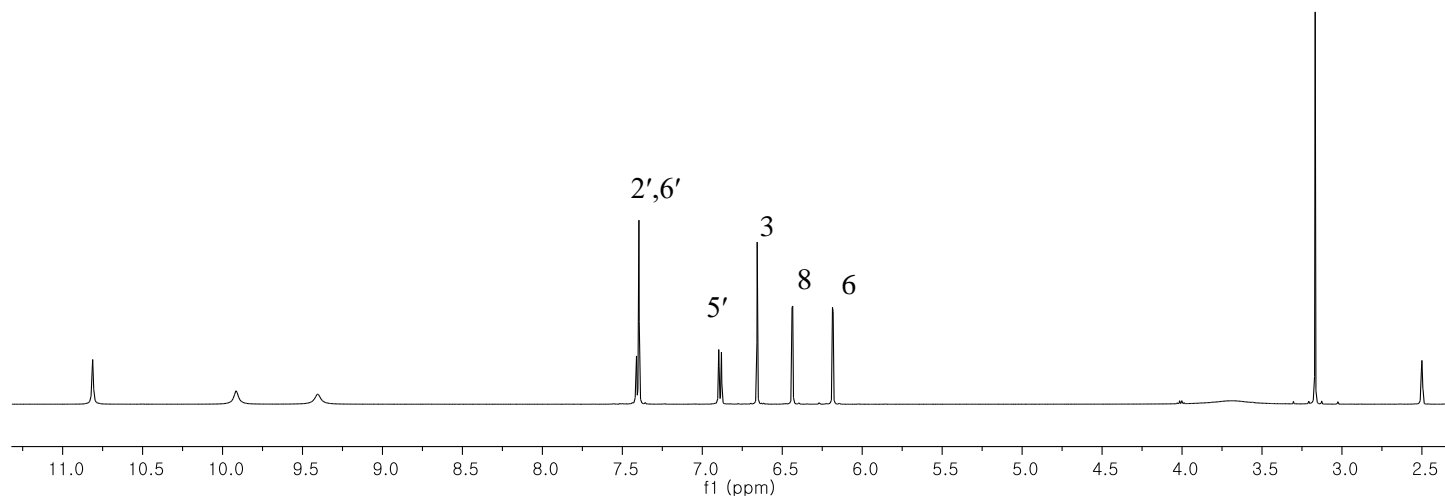


Fig. 72. ¹³C-NMR spectrum of compound **18**



152

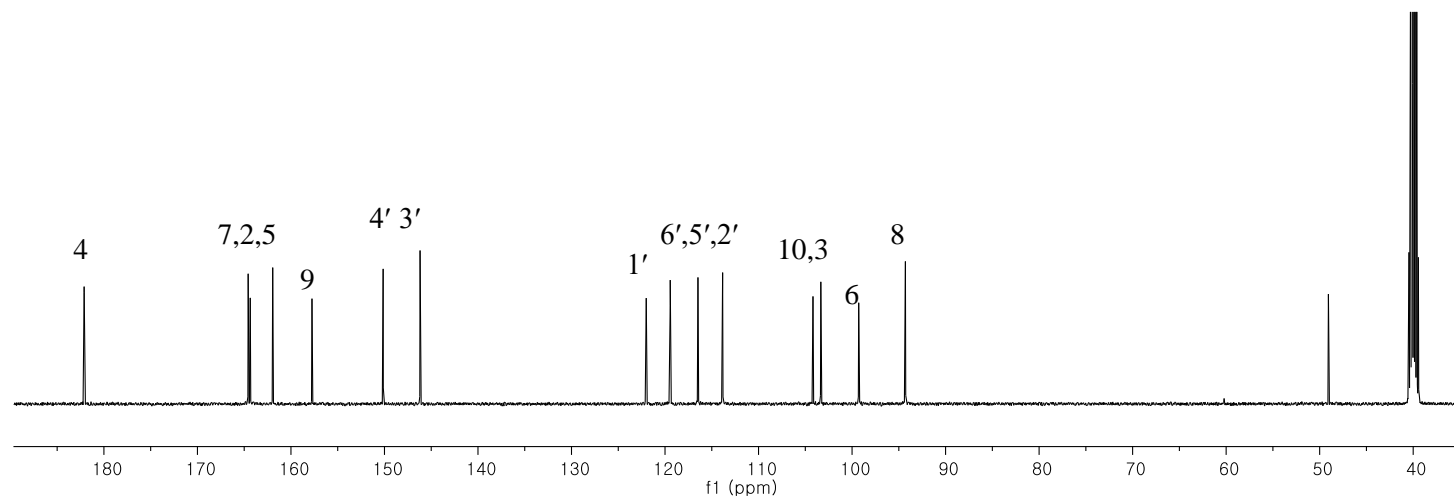
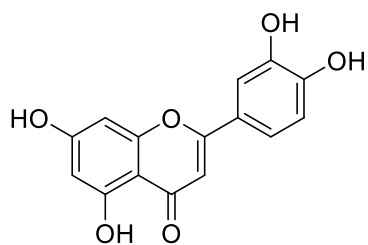


Fig. 74. ¹³C-NMR spectrum of compound **19**

1.17 화합물 **20**, **23**의 구조

화합물 **20** 는 황색무정형분말 화합물로서 HRESIMS 값 [m/z 497.1465 [M-H]⁻ (calcd. for C₂₆H₂₃O₁₀, 497.1448)]을 통하여 분자식 C₂₆H₂₄O₁₀ 을 얻었다. 1D NMR spectra 가 화합물 **18** 과 유사하며 ¹H NMR spectrum 에서 δ_H 7.31 (2H, s), δ_H 7.05 (1H, s), 6.58 (1H, d, J = 1.8 Hz), 6.22 (1H, d, J = 1.8 Hz) 와 3.87 (3H, s)×2 를 통해 5,7,4'-hydroxy-3',5'-dimethoxy flavone 부분구조의 존재를 알 수 있다. 추가적으로 1, 4-치환체 [δ_H 7.16 (2H, d, J = 8.4 Hz), 6.69 (2H, d, J = 8.4 Hz)] 그리고 4 개의 oxygenated proton [δ_H 4.78 (1H, t, J = 4.9 Hz), 4.31 (1H, dd, J = 8.8, 4.9 Hz), 3.72 (1H, m), 3.48 (1H, m)]이 발견된다. 2D NMR spectra 에 의해 4-hydroxyphenylpropanol 부분구조를 동정할 수 있으며, HMBC correlation (H-8''/C-4')에 의해 연결고리를 확인하였다. 그리고 H-7''의 coupling constant (J = 4.4 Hz)로 입체구조가 *erythro* 형태임을 알 수 있으며, 이상의 데이터와 문헌과의 비교를 통해 화합물 **20** 을 tricin 4'-O-[*erythro*-(4-hydroxyphenyl)propane] ether 로 동정하였다 (Chang et al., 2010).

화합물 **23** 은 **20** 과 같은 황색무정형 분말형태의 플라보노이드이며, 분자식도 같은 C₂₆H₂₄O₁₀ 이다 [HRESIMS m/z 497.1465 [M-H]⁻ (calcd. for C₂₆H₂₃O₁₀, 497.1448)]. 1D NMR spectra 가 화합물 **20** 과 거의 똑같으며 ¹H NMR spectrum 에서 δ_H 7.31 (2H, s), δ_H 7.05 (1H, s), 6.58 (1H, d, J = 1.8 Hz), 6.22 (1H, d, J = 1.8 Hz), 3.87 (3H, s)×2 를 통해 5,7,4'-hydroxy-3',5'-dimethoxy flavone 부분구조의 존재를 알 수 있으며 4-hydroxyphenylpropanol

부분구조 [δ_{H} 7.16 (2H, d, $J = 8.4$ Hz), 6.69 (2H, d, $J = 8.4$ Hz), 4.78 (1H, t, $J = 4.9$ Hz), 4.31 (1H, dd, $J = 8.8, 4.9$ Hz), 3.72 (1H, m), 3.48 (1H, m)]의 존재를 알 수 있다. 화합물 **20** 과의 차이점은 H-7''의 coupling constant ($J = 8.4$ Hz)값이다. 이는 입체구조 형태가 *threo* 형태이며, 이상의 데이터와 문헌치와의 비교를 통해 화합물 **23** 이 tricin 4'-O-[*threo*-(4-hydroxyphenyl) propane] ether 임을 알 수 있다 (Chang et al., 2010).

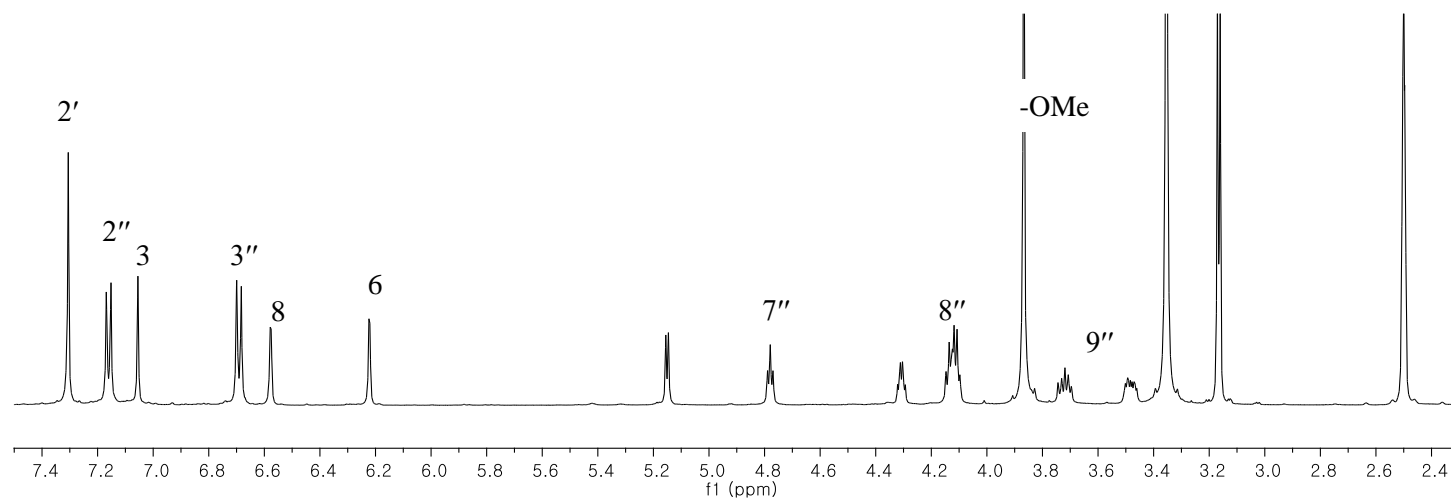
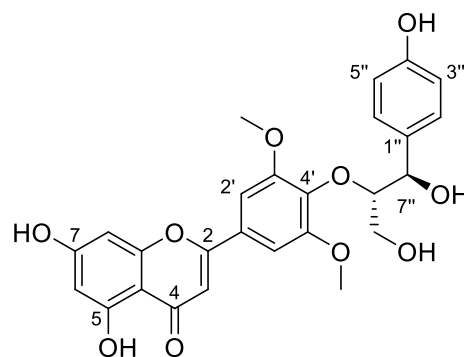


Fig. 75. ^1H -NMR spectrum of compound **20**

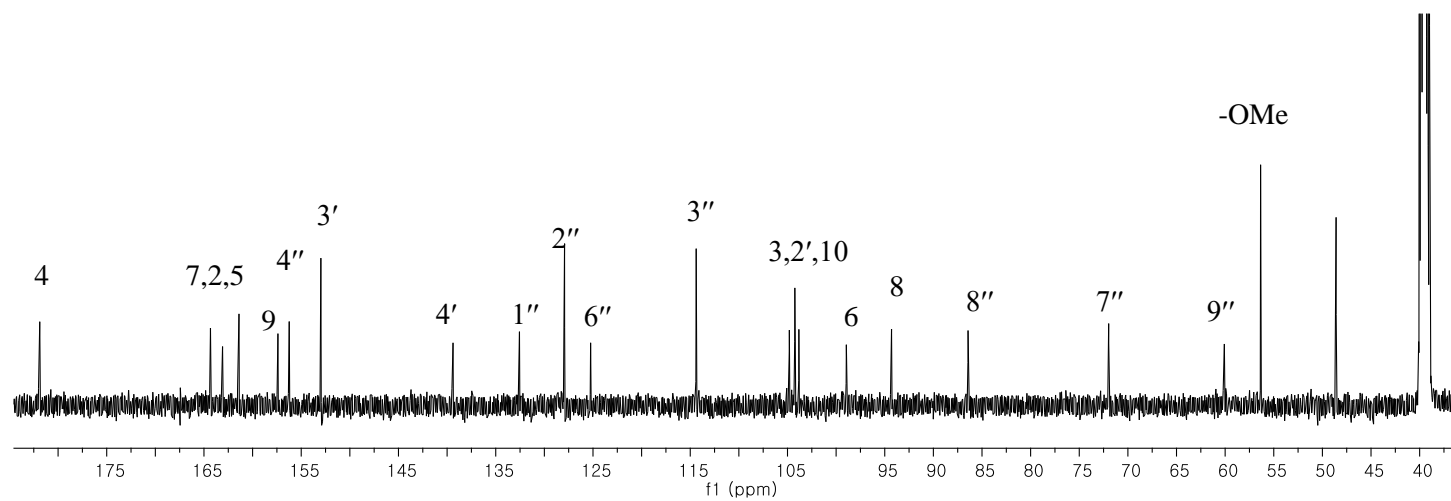
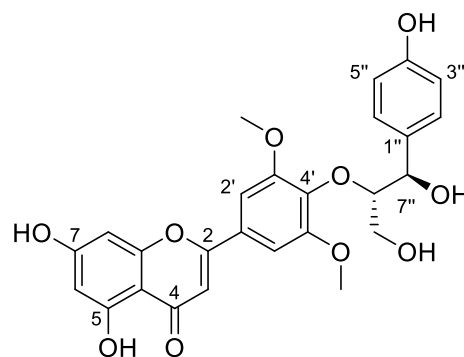


Fig. 76. ^{13}C -NMR spectrum of compound **20**

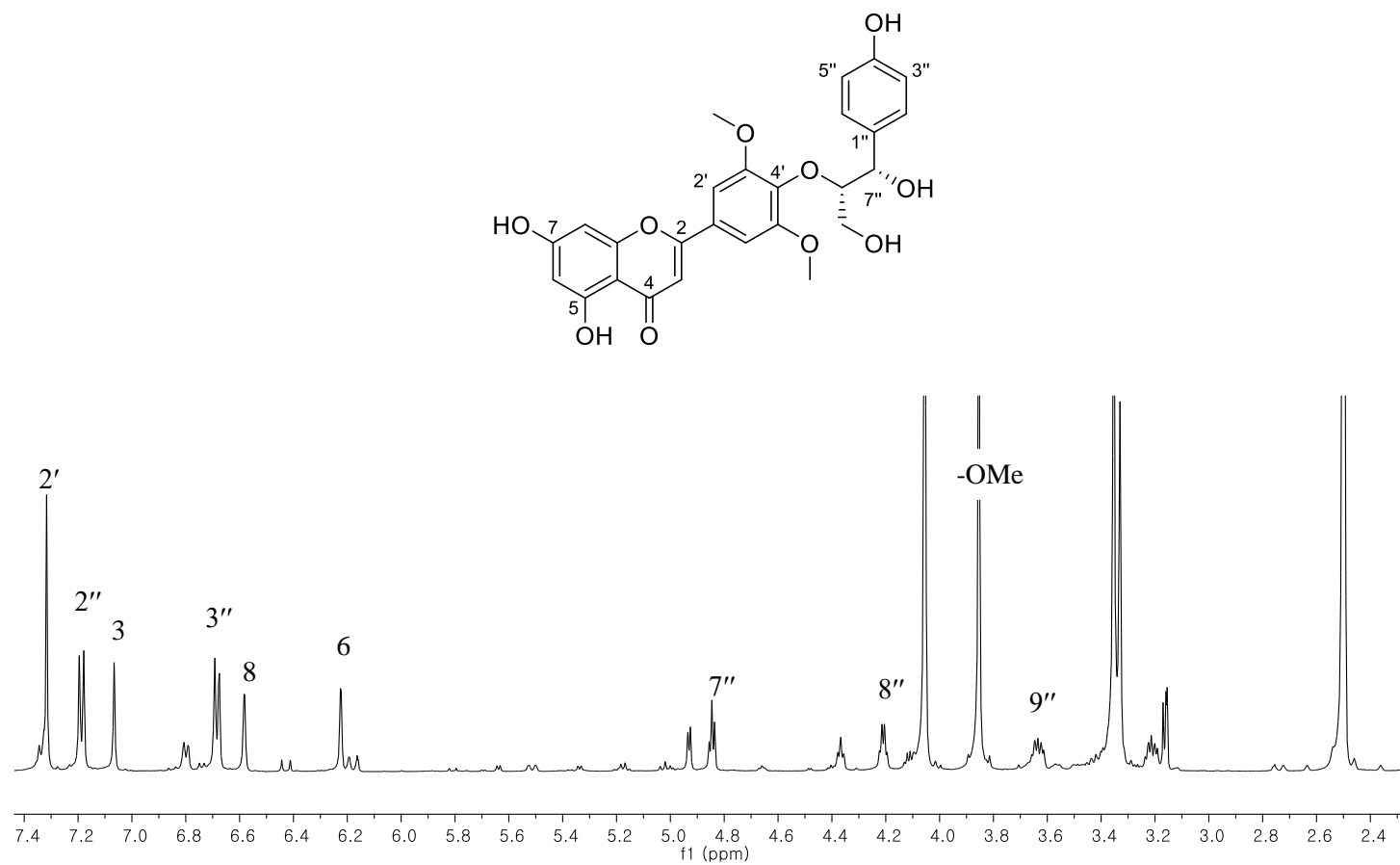


Fig. 77. ^1H -NMR spectrum of compound **23**

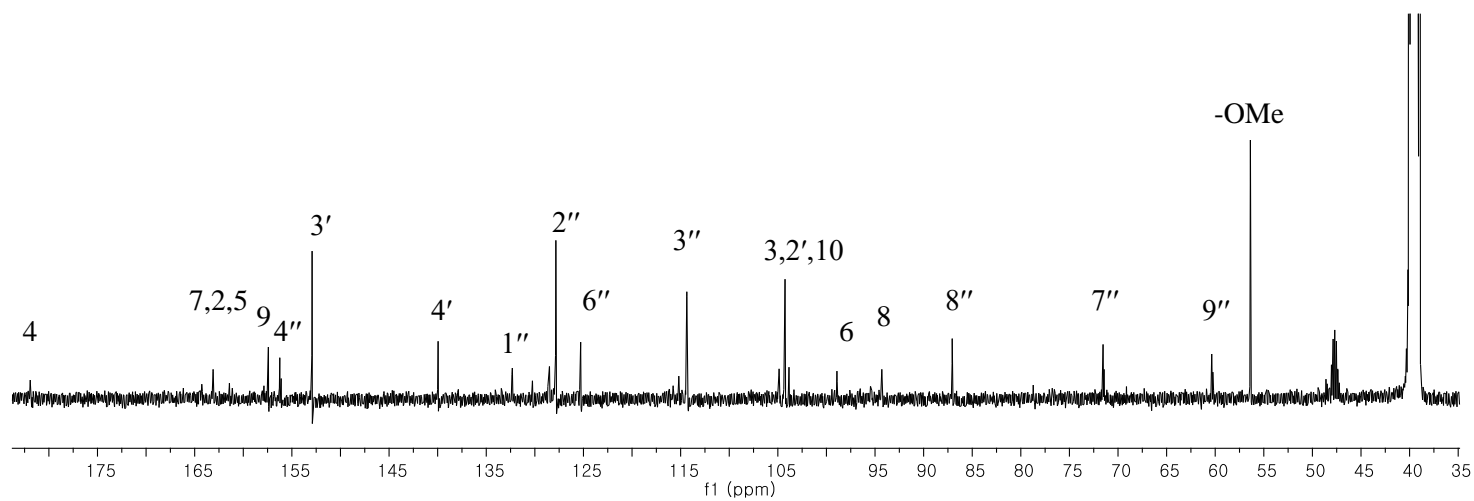
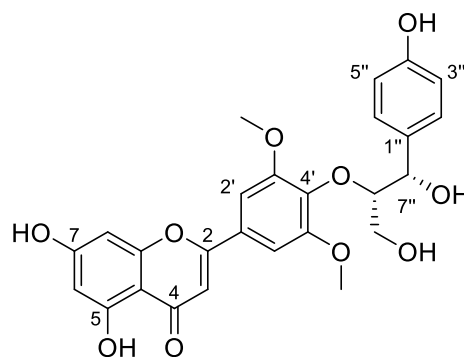


Fig. 78. ^{13}C -NMR spectrum of compound **23**

1.18 화합물 **21**, **22**의 구조

화합물 **21** 은 황색무정형 화합물로 분자식이 $C_{28}H_{28}O_{11}$ 이다 [m/z 563.1520 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{28}H_{28}O_{11}Na$, 563.1529)]. 1D NMR spectra 가 화합물 **20** 과 거의 유사하나, 1H NMR spectrum 에서 δ_H 7.31 (2H, s), δ_H 7.06 (1H, s), 6.58 (1H, s), 6.23 (1H, s)과 3.86 (3H, s) $\times 2$ 를 통해 5,7,4'-hydroxy-3',5'-dimethoxy flavone 부분구조와 1,3,4-치환체 [δ_H 6.85 (1H, s), 6.73 (2H, m)], 세 개의 oxygenated proton [δ_H 4.42 (1H, d, $J = 6.2$ Hz), 4.28 (1H, dd, $J = 10.5, 4.9$ Hz), 3.56 (1H, m), 3.17 (1H, d, $J = 4.7$ Hz)], 두 개의 methoxyl 기 [δ_H 3.74 (3H, s), 3.06 (3H, s)]를 추가적으로 확인할 수 있다. 2D NMR spectra 를 통해 부분구조 guaiacyl-(7''-O-methyl)-glycerol 을 동정할 수 있으며, HMBC correlation (H-8''/C-4')을 통하여 연결을 하였다. Glycerol 의 입체구조는 H-7''의 coupling constant ($J = 6.2$ Hz)를 통하여 *threo* 형태임을 알 수 있다. 따라서 화합물 **21** 의 구조를 문헌치와 비교하여 tricin 4'-O-[*threo*- β -guaiacyl-(7''-O-methyl)-glyceryl] ether 로 동정하였다 (Bai et al., 2015).

화합물 **22** 역시 황색분말의 플라보노이드이며, 분자식은 $C_{28}H_{28}O_{11}$ 이다 [m/z 563.1519 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{28}H_{28}O_{11}Na$, 563.1529)]. 1D NMR spectra 가 화합물 **21** 과 거의 똑같으며 1H NMR spectrum 에서 5,7,4'-hydroxy-3',5'-dimethoxy flavone [δ_H 7.31 (2H, s), δ_H 7.06 (1H, s), 6.58 (1H, s), 6.23 (1H, s), 3.86 (3H, s) $\times 2$]과 guaiacyl-(7''-O-methyl)-glycerol [δ_H 6.86 (1H, s), 6.72 (1H, m), 6.68 (1H, d, $J = 8.4$ Hz), 4.42 (1H, d, $J = 6.2$ Hz), 4.28 (1H, dd, $J = 10.5,$

4.9 Hz), 3.74 (3H, s), 3.56 (1H, m), 3.17 (1H, d, $J = 4.7$ Hz), 3.06 (3H, s)]을 확인할 수 있다. 화합물 **21** 과 다른 점은 glycerol 의 입체구조 형태이다. H-7'' 의 coupling constant ($J = 3.8$ Hz)에 의해 *erythro* 형태임을 동정할 수 있으며, 따라서 화합물 **22** 을 tricin 4'-*O*-[*erythro*- β -guaiacyl-(7''-*O*-methyl)-glyceryl] ether 로 문헌과의 비교를 통해 확인하였다 (Bai et al., 2015).

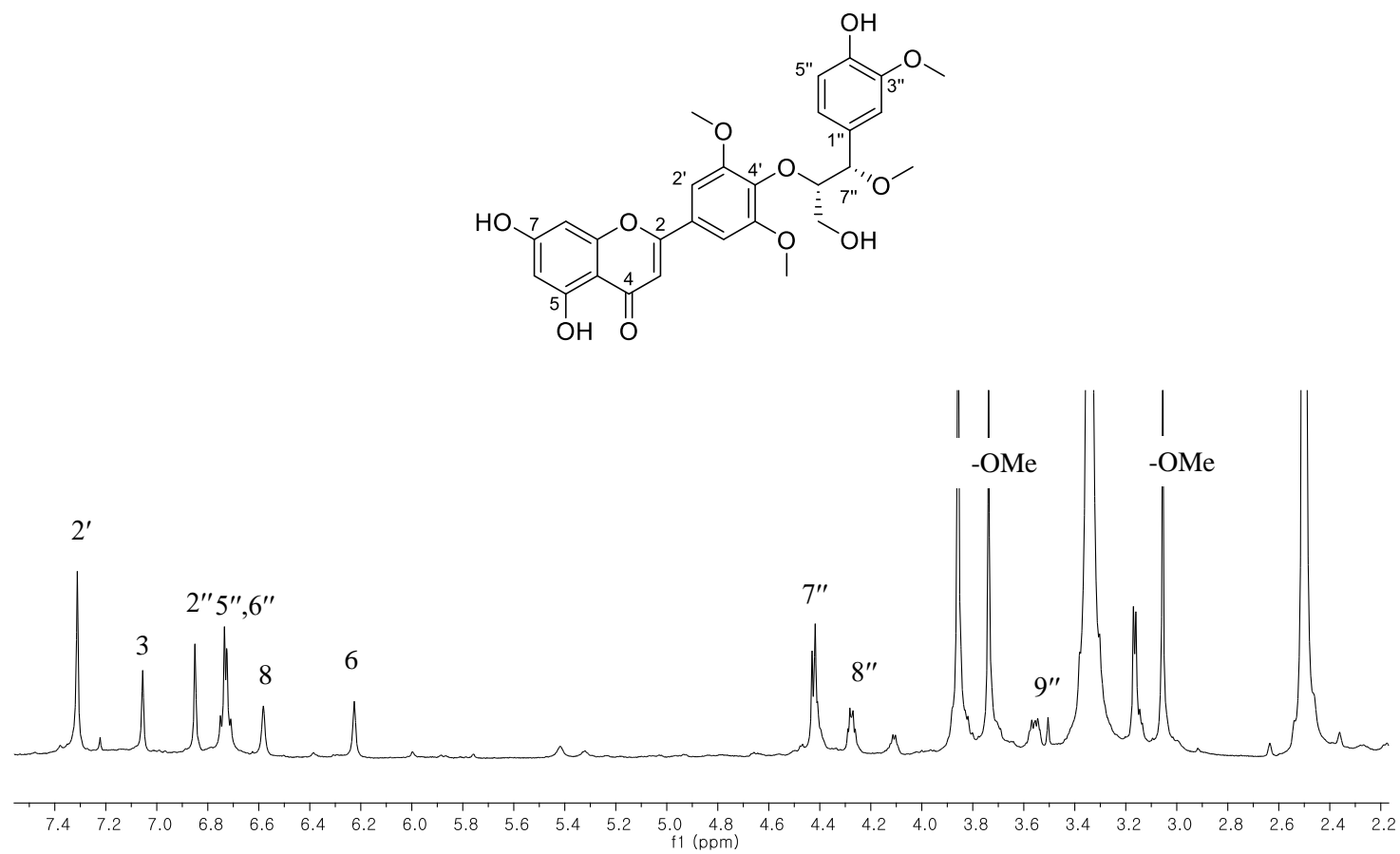


Fig. 79. ^1H -NMR spectrum of compound **21**

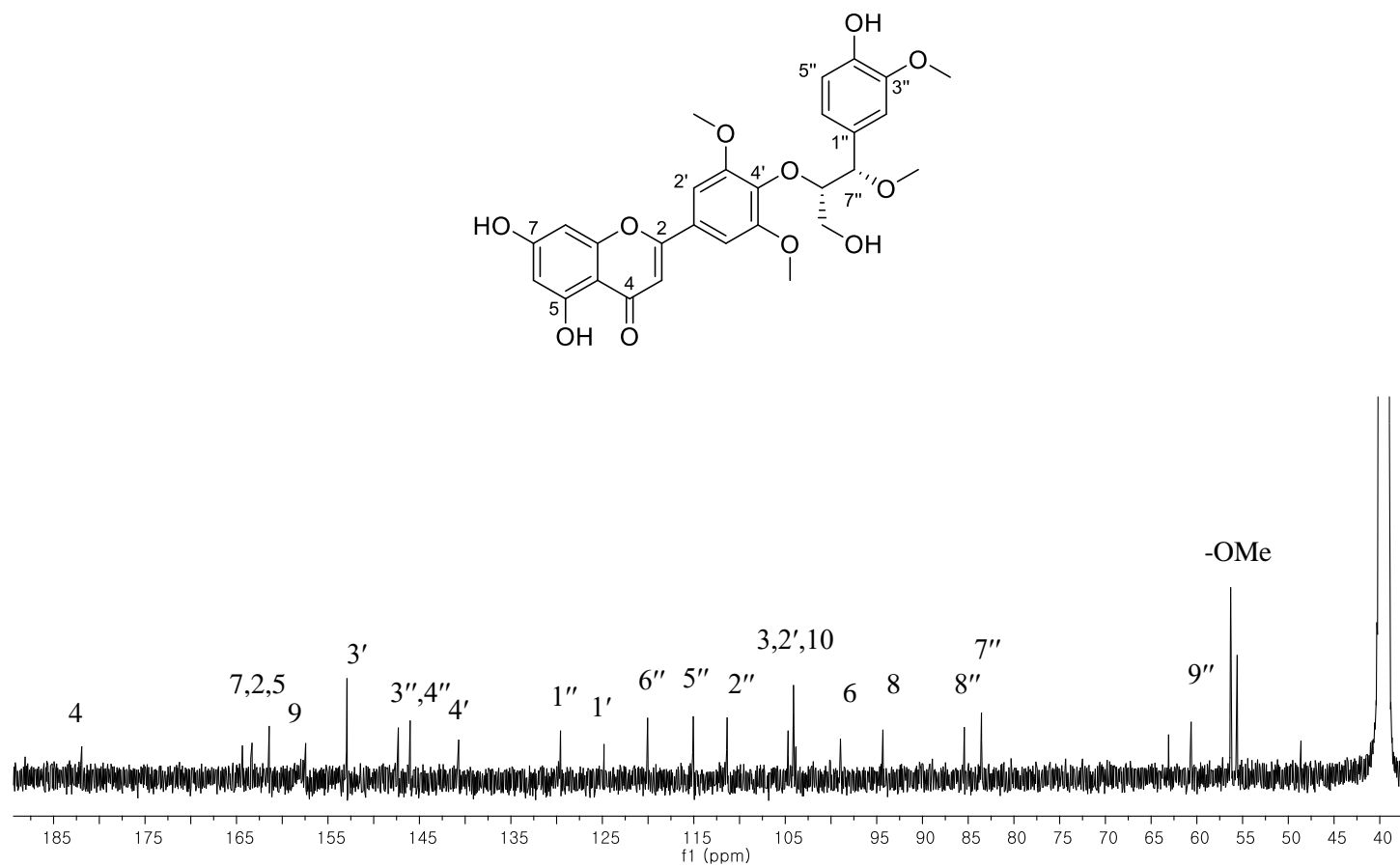


Fig. 80. ^{13}C -NMR spectrum of compound **21**

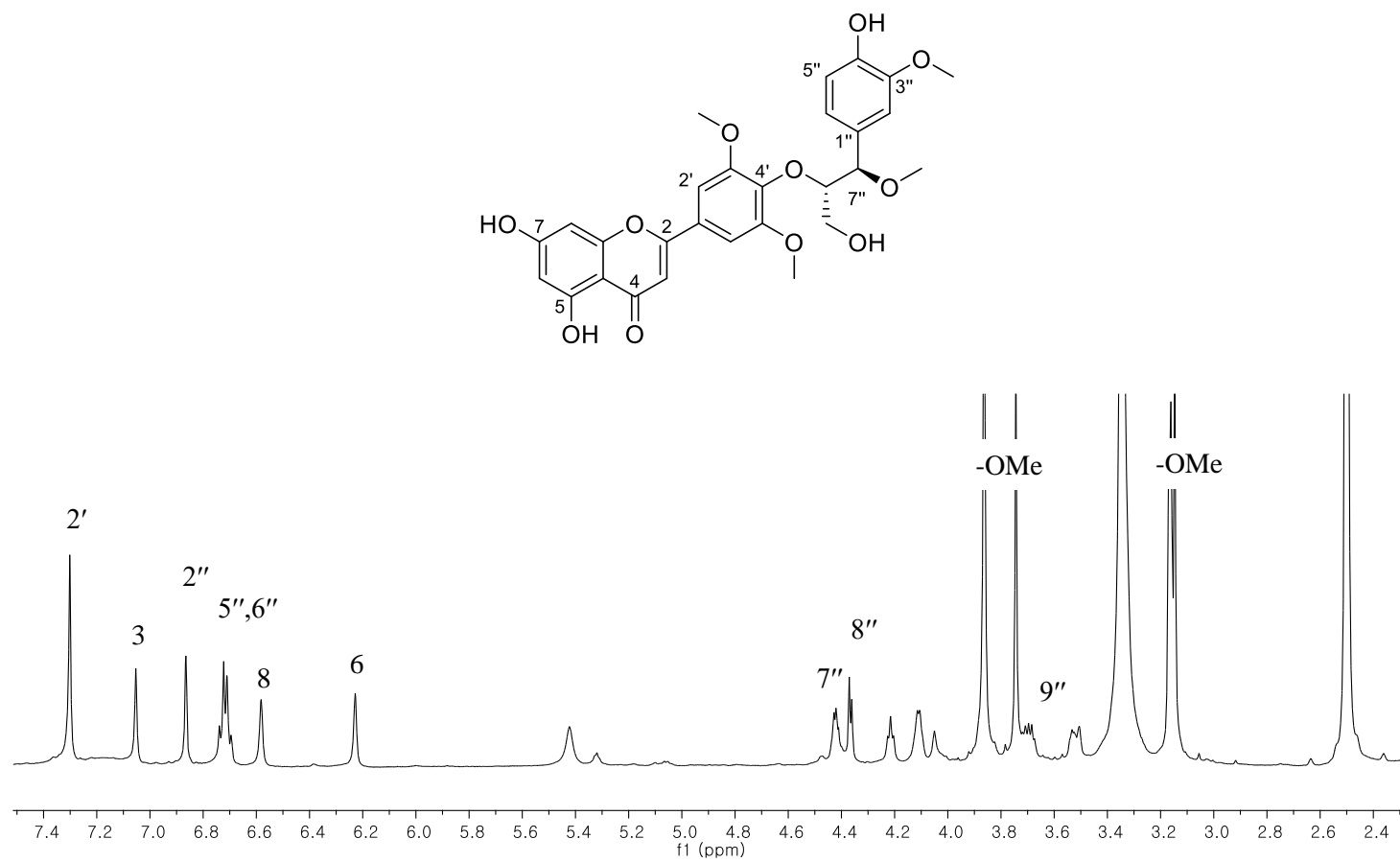


Fig. 81. ^1H -NMR spectrum of compound **22**

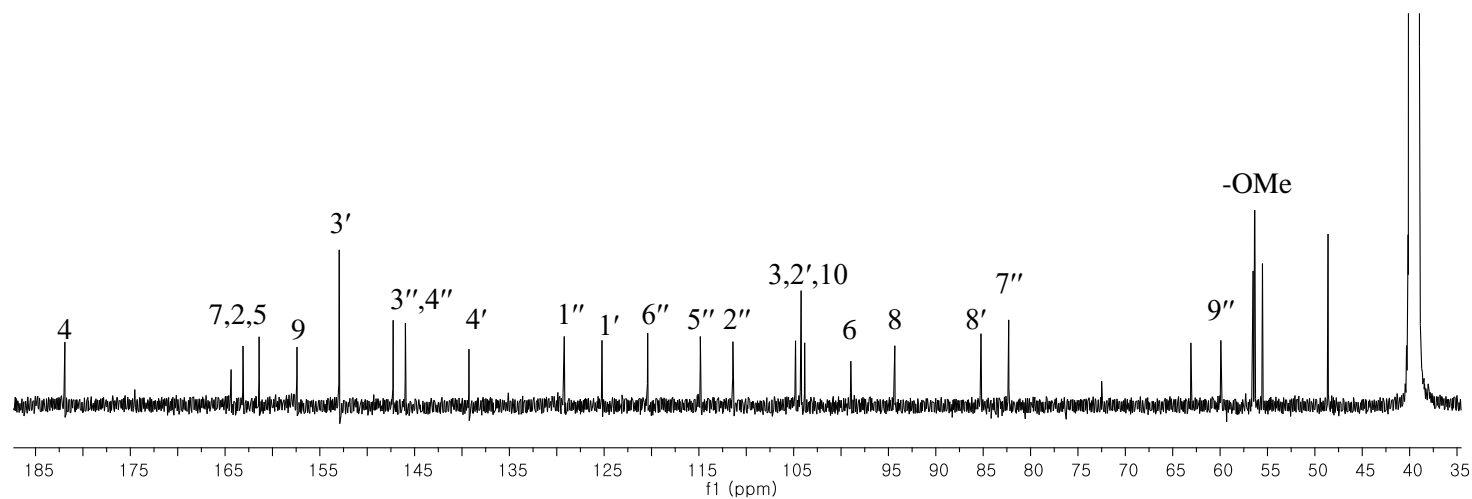
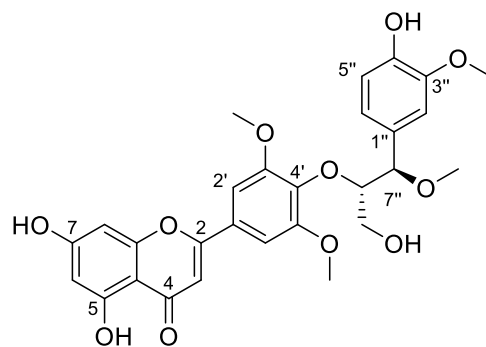


Fig. 82. ^{13}C -NMR spectrum of compound **22**

1.19 화합물 **24**의 구조

화합물 **24**는 황색무정형 화합물로서 HRESIMS 값 m/z 459.1281 $[M + Na]^+$ (calcd. for $C_{21}H_{24}O_{10}Na$, 459.1267)에 의해 분자식이 $C_{21}H_{24}O_{10}$ 이다. 1H NMR 과 HSQC spectra에서 두 개의 *ortho*-coupling signal [δ_H 7.07 (1H, d, $J = 8.4$ Hz), 6.68 (1H, d, $J = 8.4$ Hz)], 두 개의 *meta*-coupling signal [δ_H 6.18 (1H, d, $J = 2.2$ Hz), 5.95 (1H, d, $J = 2.2$ Hz)], anomeric proton [5.04 (1H, d, $J = 7.2$ Hz)], 두 개의 methylene 피크 [δ_H 2.88 (2H, t, $J = 7.4$ Hz), 3.44 (2H, m)]를 확인할 수 있다. ^{13}C NMR spectrum에서 하나의 ketone (δ_C 206.6), 두 개의 aromatic 링 (δ_C 167.7, 166.0, 162.4, 156.5, 134.0, 130.5 \times 2, 116.2 \times 2, 106.8, 95.5, 98.4), anomeric carbon (δ_C 102.1), 다섯 개의 oxygenated 피크 (δ_C 74.8, 78.6, 71.1, 78.5, 62.5) 그리고 두 개의 methylene 피크 (δ_C 47.1, 30.9)을 보이며, chalcone 골격의 화합물임을 추정할 수 있다. 문헌치와의 비교로 화합물 **24**는 phloridzin 이다 (Turner et al., 2005).

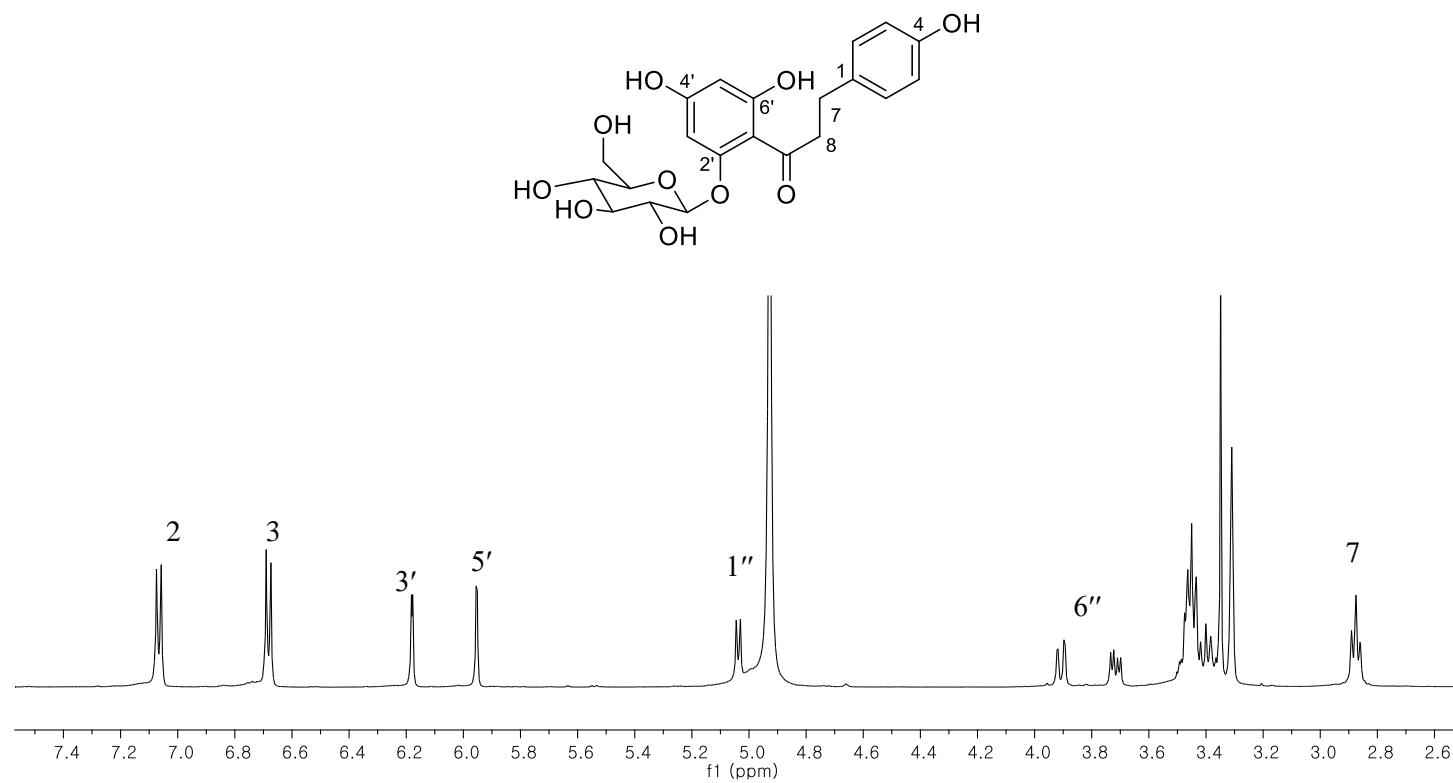


Fig. 83. ^1H -NMR spectrum of compound **24**

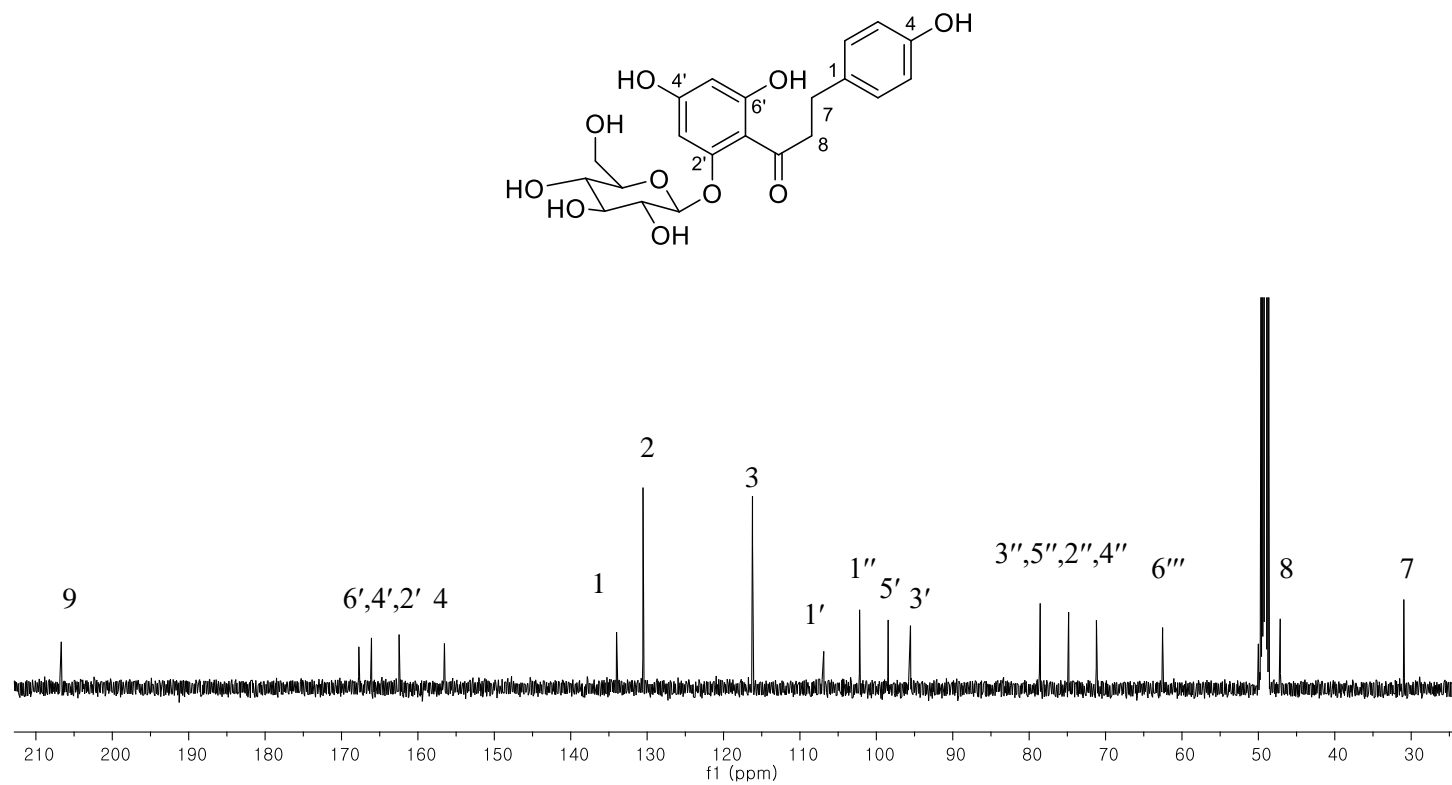


Fig. 84. ^{13}C -NMR spectrum of compound **24**

1.20 화합물 **25**, **26**, **27**, **28**의 구조

화합물 **25**는 황색무정형 분말형태이며 HRESIMS 값 m/z 595.1682 $[M+H]^+$ (calcd. for $C_{27}H_{30}O_{15}Na$, 595.1663)으로 분자식 $C_{27}H_{30}O_{15}$ 을 구하였다. 1H NMR spectrum에서 1,3,4-치환체 signal [δ_H 7.45 (1H, dd, $J = 8.4, 2.0$ Hz), 7.41 (1H, d, $J = 2.0$ Hz), 6.91 (1H, d, $J = 8.4$ Hz)], *meta*-coupling 피크 [δ_H 6.45 (1H, d, $J = 2.0$ Hz), 6.74 (1H, d, $J = 2.0$ Hz)] 그리고 singlet 피크 [δ_H 6.75 (1H, s)]를 확인할 수 있었다. 이것은 flavone 골격의 5, 7, 3', 4'위치가 치환되어 있음을 말하며, 두 개의 anomeric signal [δ_C/δ_H 99.8/5.08 (1H, d, $J = 7.3$ Hz), 99.5/4.54 (1H, s)]과 methyl기 [δ_C/δ_H 17.8/1.07 (3H, d, $J = 6.2$ Hz)]를 통해 rutinose의 존재 또한 알 수 있다. 이를 토대로 문헌과 비교를 하여 화합물 **25**를 luteolin-7-*O*-rutinoside로 동정하였다 (Siciliano et al., 2004).

화합물 **26**은 황색분말의 성상으로 분자식이 $C_{27}H_{36}O_{16}$ 이다 [m/z 661.1627 $[M+H]^+$ (calcd. for $C_{27}H_{31}O_{16}$, 661.1612)]. 1H NMR spectrum에서 보이는 δ_H 7.93 (1H, d, $J = 2.0$ Hz), 7.58 (1H, dd, $J = 8.5, 2.0$ Hz), 6.92 (1H, d, $J = 8.5$ Hz), 6.45 (1H, d, $J = 2.0$ Hz), 6.20 (1H, d, $J = 2.0$ Hz) signal을 통해 이 구조는 flavonol 골격에 3, 5, 7, 3', 4' 위치가 치환되어 있음을 알 수 있다. 두 개의 anomeric signal [δ_C/δ_H 98.5/5.68 (1H, d, $J = 7.3$ Hz), 102.3/4.79 (1H, d, $J = 4.7$ Hz)]과 아홉 개의 carbon 값 (δ_C 79.6, 77.4, 77.1, 72.0, 70.6, 69.6, 65.8, 62.4, 60.0)을 통하여 α -D-xylopyranoside 와 β -D-glucopyranoside의 존재를 알 수 있다. HMBC (δ_H 3.85/ δ_C 146.9)를 통해 methoxyl기가 C-3'위치에 있으며,

이상의 데이터와 문헌치와의 비교로 화합물 **26**을 isorhamnetin 3-*O*- α -D-xylopyranosyl-(1 \rightarrow 2)- β -D-glucopyranoside로 동정하였다 (Monika et al., 2011).

황색분말 화합물 **27**의 분자식은 분자량 [m/z 611.1627 [$M + H$]⁺ (calcd. for C₂₇H₃₁O₁₆, 661.1612)]에 의해 C₂₇H₃₀O₁₆로 동정하였다. ¹H NMR spectrum에서 δ_H 7.44 (1H, m), 7.43 (1H, s), 6.93 (1H, d, J = 8.8 Hz), 6.80 (1H, d, J = 2.1 Hz), 6.61 (1H, s), 6.60 (1H, d, J = 2.1 Hz)으로 flavone 골격에 5, 7, 3', 4'가 치환되어 있는 것을 추정할 수 있다. 두 개의 anomeric signal [δ_C/δ_H 101.7/5.08 (1H, d, J = 7.1 Hz), 105.1/4.37 (1H, d, J = 7.6 Hz)]과 열 개의 carbon 피크 (δ_C 78.2, 78.1, 77.8, 77.3, 75.2, 74.8, 71.7, 71.4, 70.3, 62.9)를 통해 두 개의 β -D-glucopyranoside의 존재를 알 수 있다. 이전의 보고된 문헌과의 비교를 통해 화합물 **27**번을 luteolin-7-*O*- β -D-glucopyranosyl-(1''' \rightarrow 6'')-*O*- β -D-glucopyranoside로 동정하였다 (Amani et al., 2016).

화합물 **28**은 황색분말 성상에 분자식 C₂₁H₂₀O₁₁을 갖는다 [m/z 397.1492 [$M+Na$]⁺ (calcd. for C₁₇H₂₆O₉Na, 397.1475)]. 화합물 **27**번과 거의 유사한 NMR spectra 패턴을 가지며, ¹H NMR spectrum에서 δ_H 7.42 (1H, m), 7.42 (1H, s), 6.91 (1H, d, J = 8.3 Hz), 6.81 (1H, d, J = 1.9 Hz), 6.62 (1H, s), 6.51 (1H, d, J = 1.9 Hz)으로 luteolin의 구조를 동정할 수 있다. 그리고 하나의 β -D-glucopyranoside로 추정되는 하나의 anomeric signal [δ_C/δ_H 101.7/5.07 (1H, d, J = 5.4 Hz)]과 다섯 개의 carbon signal (δ_C 78.5, 77.9, 74.8, 71.3, 62.5)을 발견할 수 있다. 문헌치와의 비교를 통해 화합물 **28**의 구조가 luteolin-7-*O*- β -D-glucopyranoside임을 확인하였다 (Amani et al., 2016).

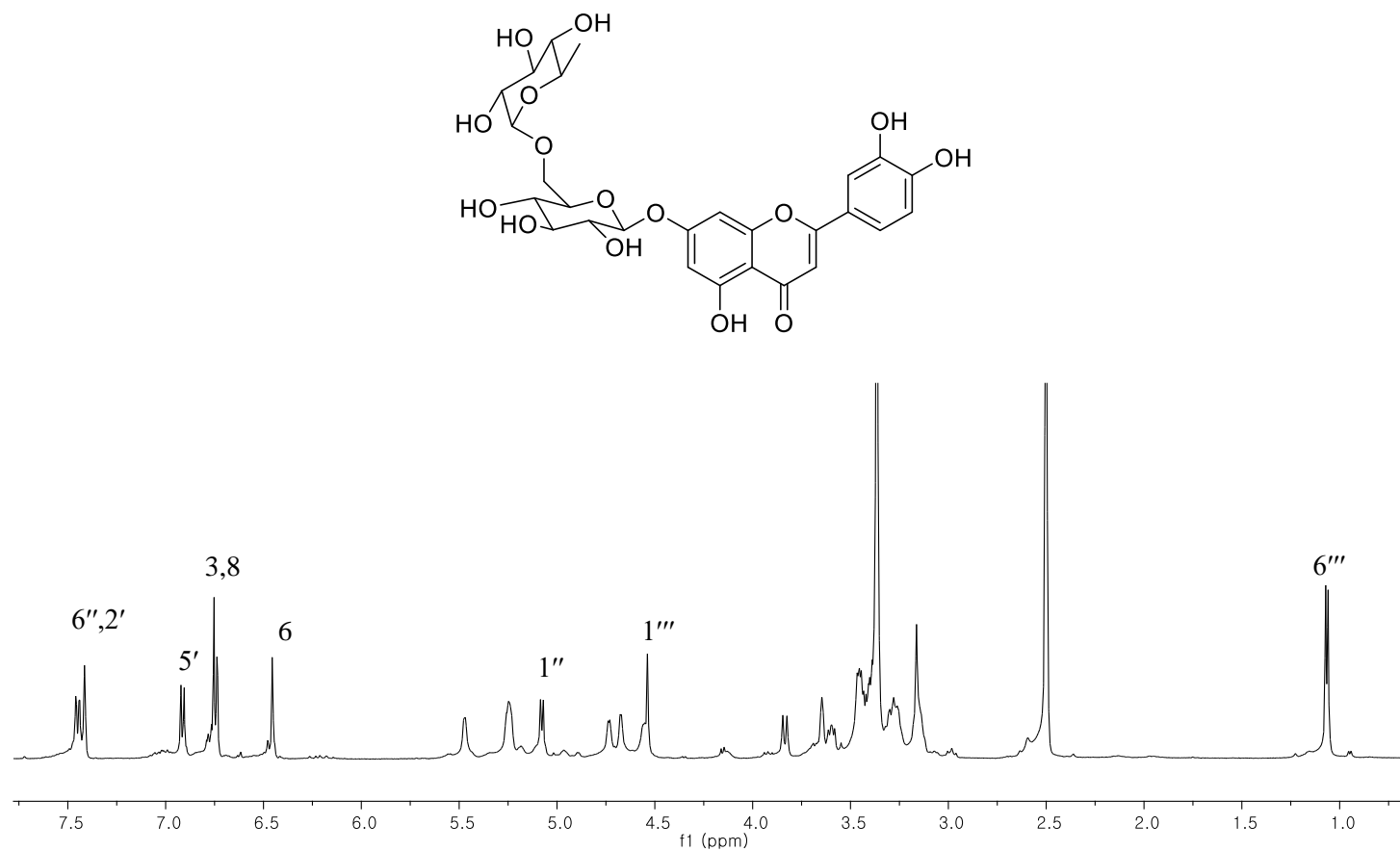
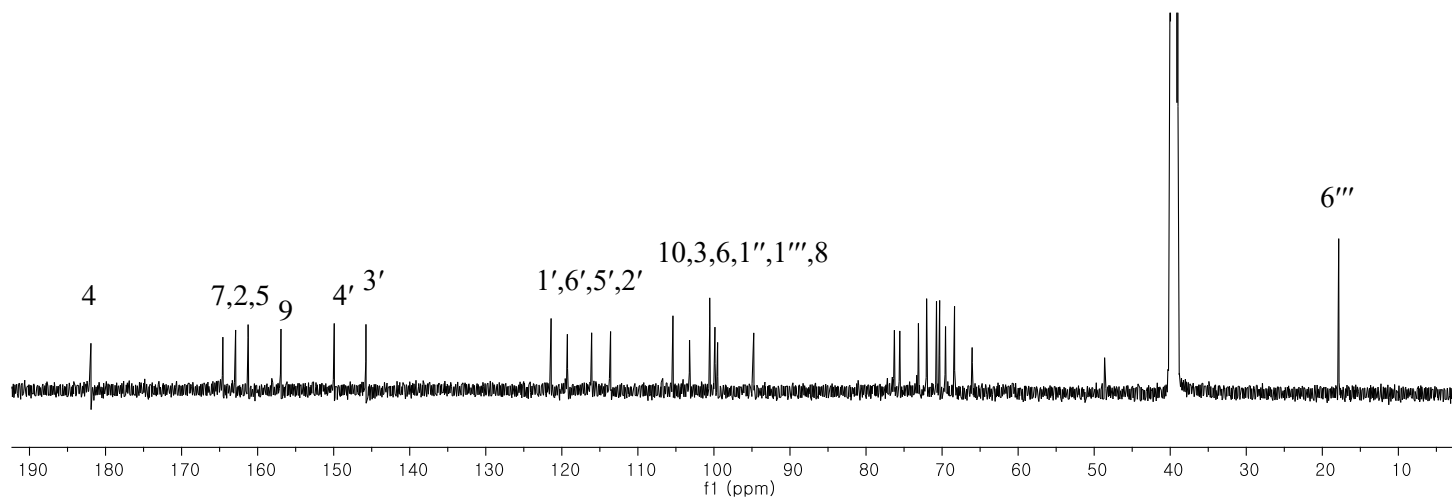


Fig. 85. ^1H -NMR spectrum of compound **25**



172

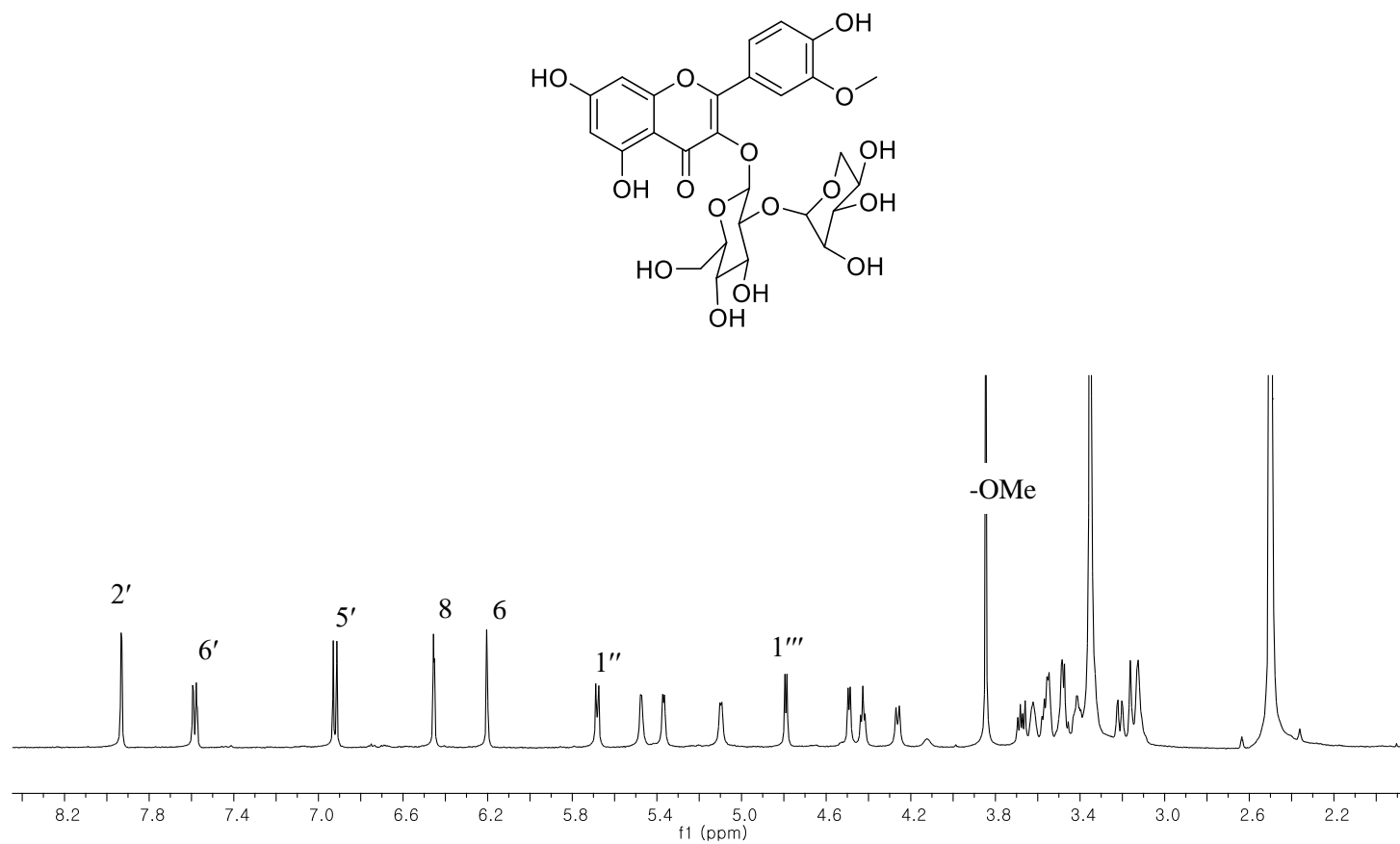


Fig. 87. ^1H -NMR spectrum of compound **26**

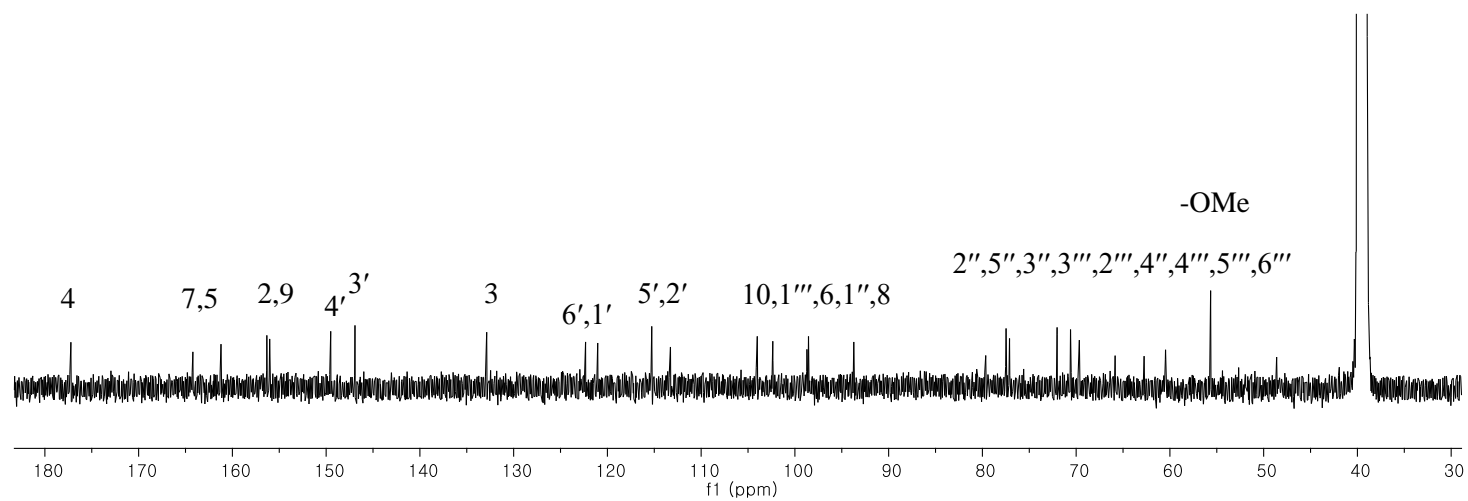
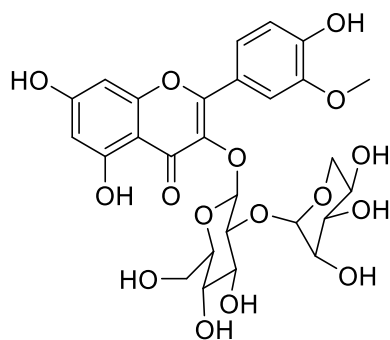


Fig. 88. ^{13}C -NMR spectrum of compound **26**

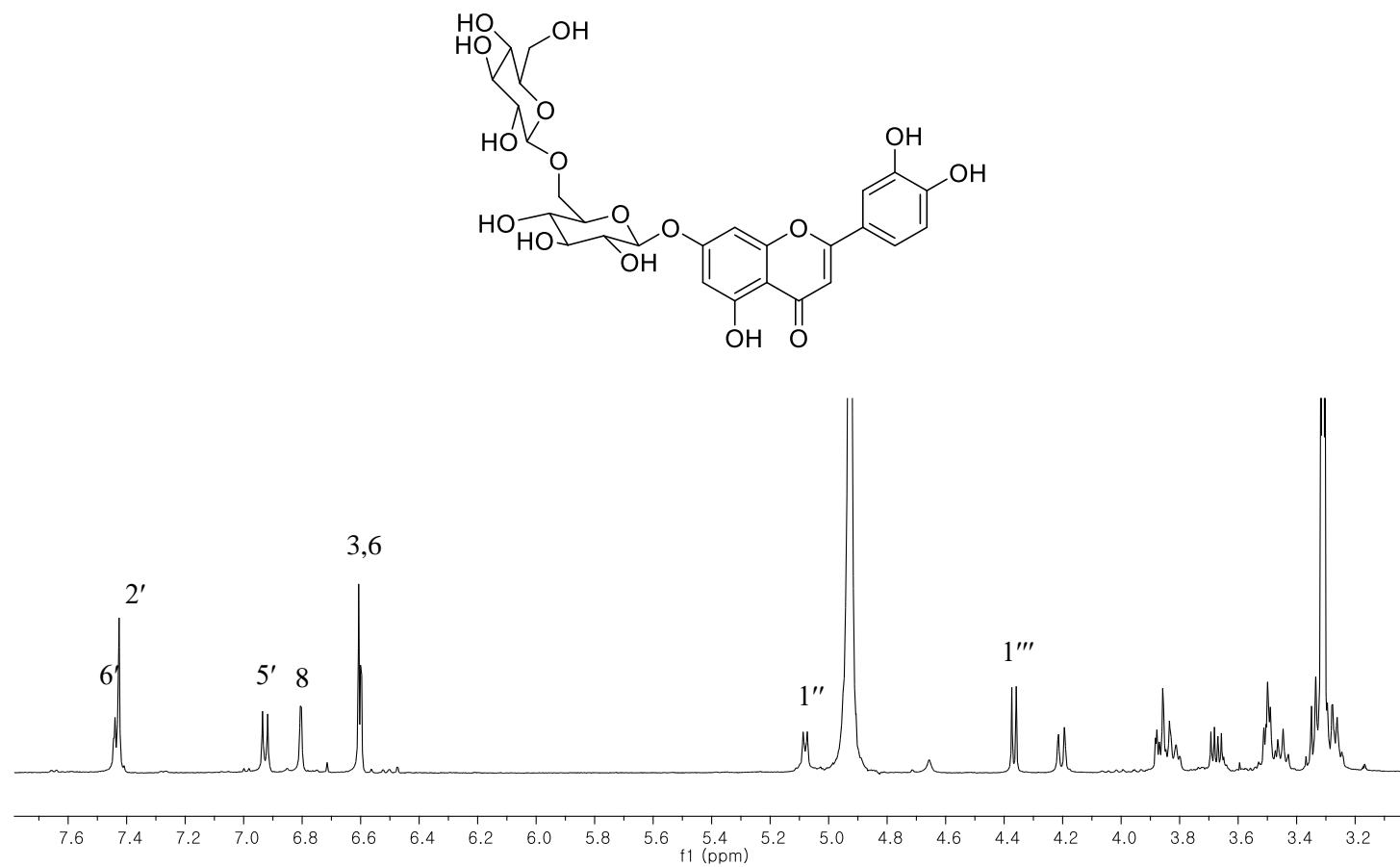


Fig. 89. ^1H -NMR spectrum of compound 27

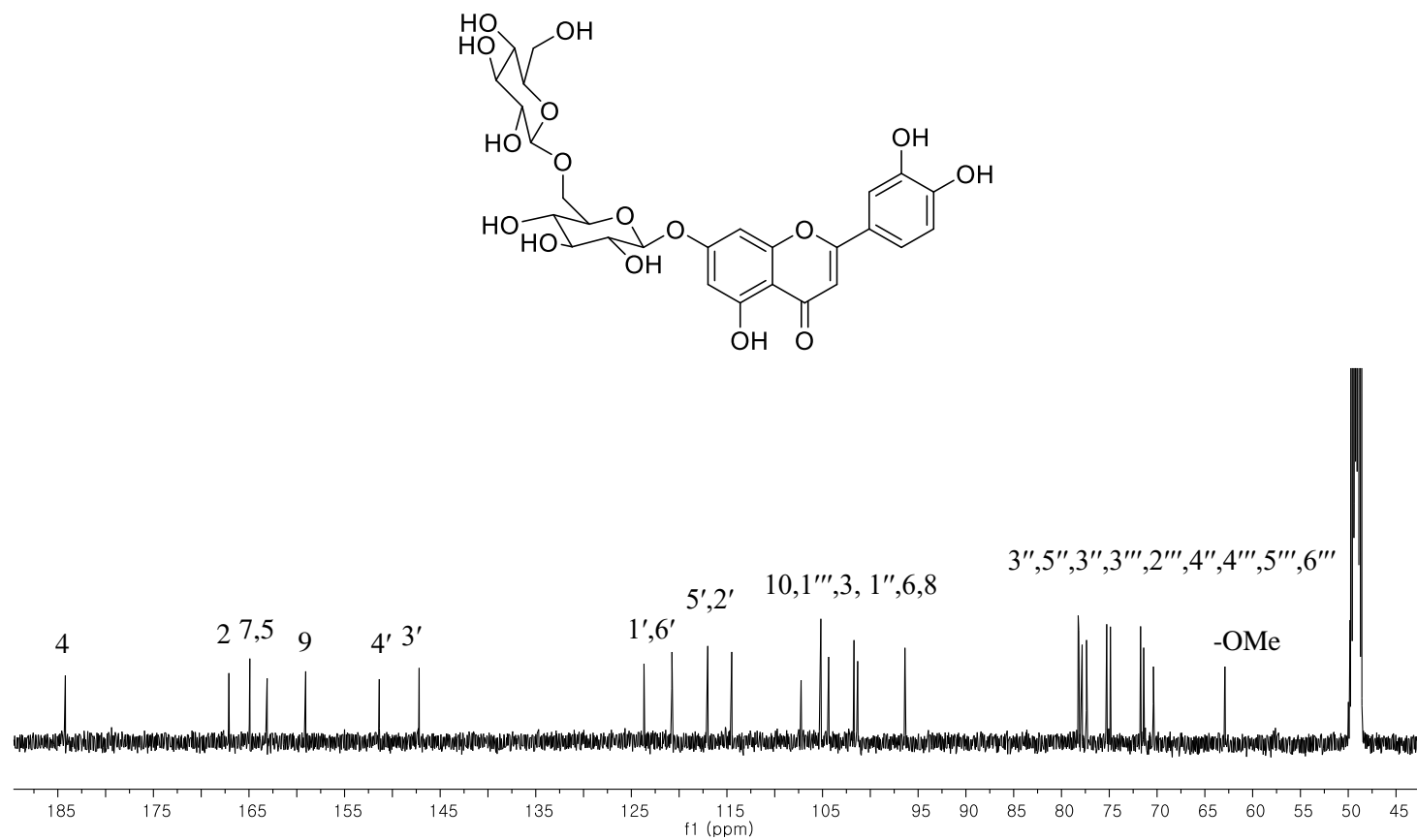


Fig. 90. ^{13}C -NMR spectrum of compound **27**

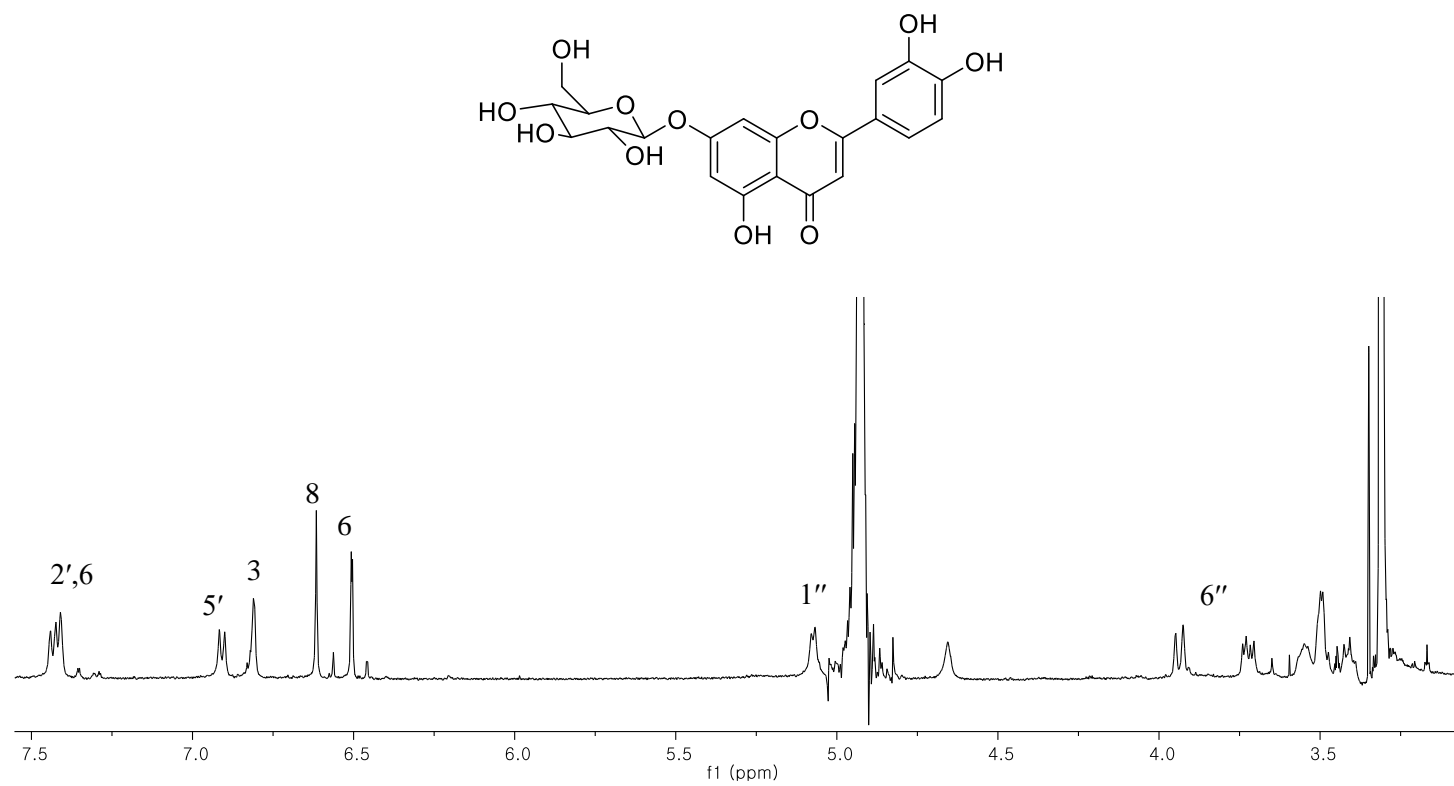


Fig. 91. ^1H -NMR spectrum of compound **28**

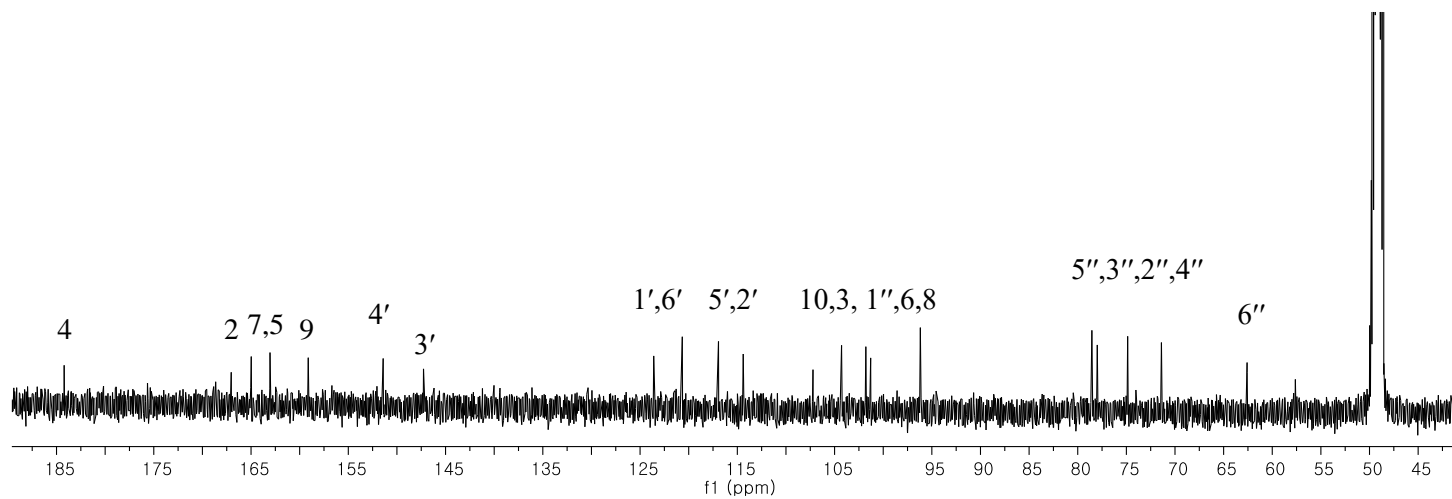
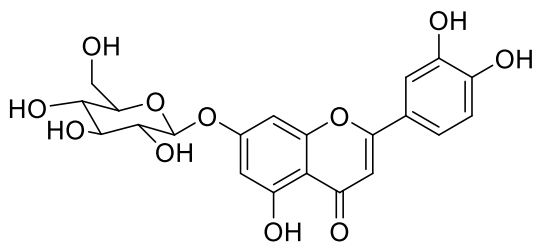


Fig. 92. ^{13}C -NMR spectrum of compound **28**

1.21 화합물 **29**, **30**의 구조

화합물 **29**은 갈색분말형태이며 분자식이 $C_{21}H_{30}O_9$ 이다 [m/z 449.1767 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{21}H_{30}O_9Na$, 449.1788)]. 1H , ^{13}C NMR spectra에서 두 개의 carbonyl기 (δ_C 181.7, 168.0), 두 쌍의 aromatic 피크 [δ_C/δ_H 150.0/5.82 (1H, d, $J = 9.9$ Hz), 143.3, 132.0, 127.5/4.88 (1H, m)], anomeric signal [δ_C/δ_H 95.5/5.54 (1H, d, $J = 8.0$ Hz)], 여섯 개의 oxygenated 피크 [δ_C/δ_H 83.4/4.73 (1H, d, $J = 11.9$ Hz), 79.0/3.38 (1H, m), 78.5/ 3.43 (1H, m), 74.2/3.37 (1H, m), 71.2/3.37 (1H, m), 62.5/3.83 (1H, d, $J = 12.6$ Hz), 3.69 (1H, dd, $J = 12.0, 4.5$ Hz)], 여섯 개의 methine group [δ_C/δ_H 55.7/1.77 (1H, d, $J = 11.9$ Hz), 43.6/2.36 (1H, m), 40.2/2.34 (1H, m), 2.27 (1H, m), 37.5/2.82 (1H, d, $J = 11.7$ Hz), 2.03 (1H, m), 31.4/2.03 (1H, m), 1.93 (1H, dd, $J = 12.9, 6.4$ Hz), 27.7/3.39 (1H, m), 2.28 (1H, m)] 그리고 두 개의 methyl기 [δ_C/δ_H 17.3/1.63 (3H, s), 13.4/1.21 (3H, d, $J = 7.0$ Hz)] 이 보이므로, 15 + 6개의 carbon피크를 토대로 sesquiterpene 구조의 하나의 glucose가 연결되어 있는 것을 추정할 수 있다. 문헌치와 비교를 통해 화합물 **29**를 11 β ,13-dihydrotaraxinic acid 1'-*O*- β -D-glucopyranoside로 동정하였다 (Michaska et al., 2010).

갈색 분말 화합물 **30**은 HRMS [m/z 447.1641 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{21}H_{28}O_9Na$, 447.1631)]를 통해 분자식 $C_{21}H_{28}O_9$ 을 구할 수 있다. NMR spectra가 화합물 **29**와 거의 유사하며, 1D NMR spectra에서 두 개의 carbonyl기 (δ_C 172.9, 168.0), 세 쌍의 aromatic 피크 [δ_C/δ_H 149.8/5.84 (1H, dd, $J = 12.8, 3.7$ Hz), 144.7, 142.1, 132.9, 127.4/4.98 (1H, dd, $J = 10.0, 1.1$ Hz), 120.5/6.18 (1H, d, $J = 3.6$ Hz), 5.64 (1H, d, $J = 3.6$ Hz)], anomeric signal [δ_C/δ_H 101.9/4.33 (1H, d, $J = 7.8$ Hz)], 여섯 개의 oxygenated 피크 [δ_C/δ_H 83.4/4.74 (1H, dd, $J = 10.1, 8.7$ Hz), 79.0/3.38 (1H, m), 78.5/ 3.43 (1H, m), 74.1/3.37 (1H, m), 71.3/3.37 (1H, m), 62.5/3.83 (1H, dd, $J = 12.2, 1.8$ Hz), 3.69 (1H, dd, $J = 12.0, 4.5$ Hz)], 다섯 개의 methine group [δ_C/δ_H 55.7/2.72 (1H, m), 40.2/2.37 (1H, m), 2.30 (1H, m), 37.5/2.89 (1H, dd, $J = 12.5, 5.8$ Hz), 2.13 (1H, m), 31.4/2.23 (1H, m), 2.09 (1H, m), 27.8/3.39 (1H, m), 2.32 (1H, m)] 그리고 하나의 methyl기 [δ_C/δ_H 17.4/1.64 (3H, d, $J = 1.2$ Hz)]가 보이며, 화합물 **29**와의 차이점은 C-11, 13이 더블본드 형태이다. 문헌치와의 비교를 통해 화합물 **30**을 taraxinic acid 1'-O- β -D-glucopyranoside 로 동정하였다 (Hansel et al., 1980).

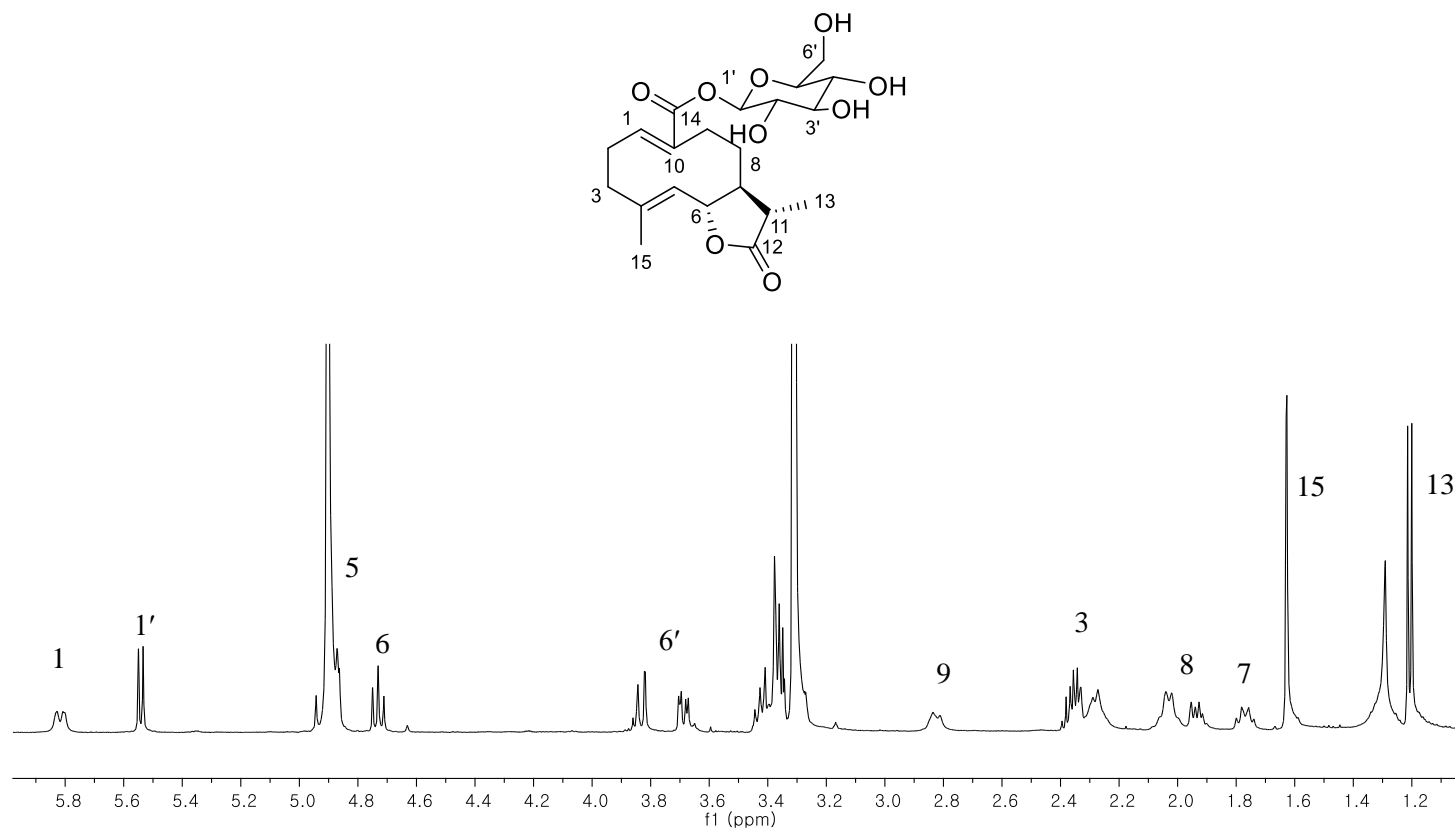


Fig. 93. ^1H -NMR spectrum of compound **29**

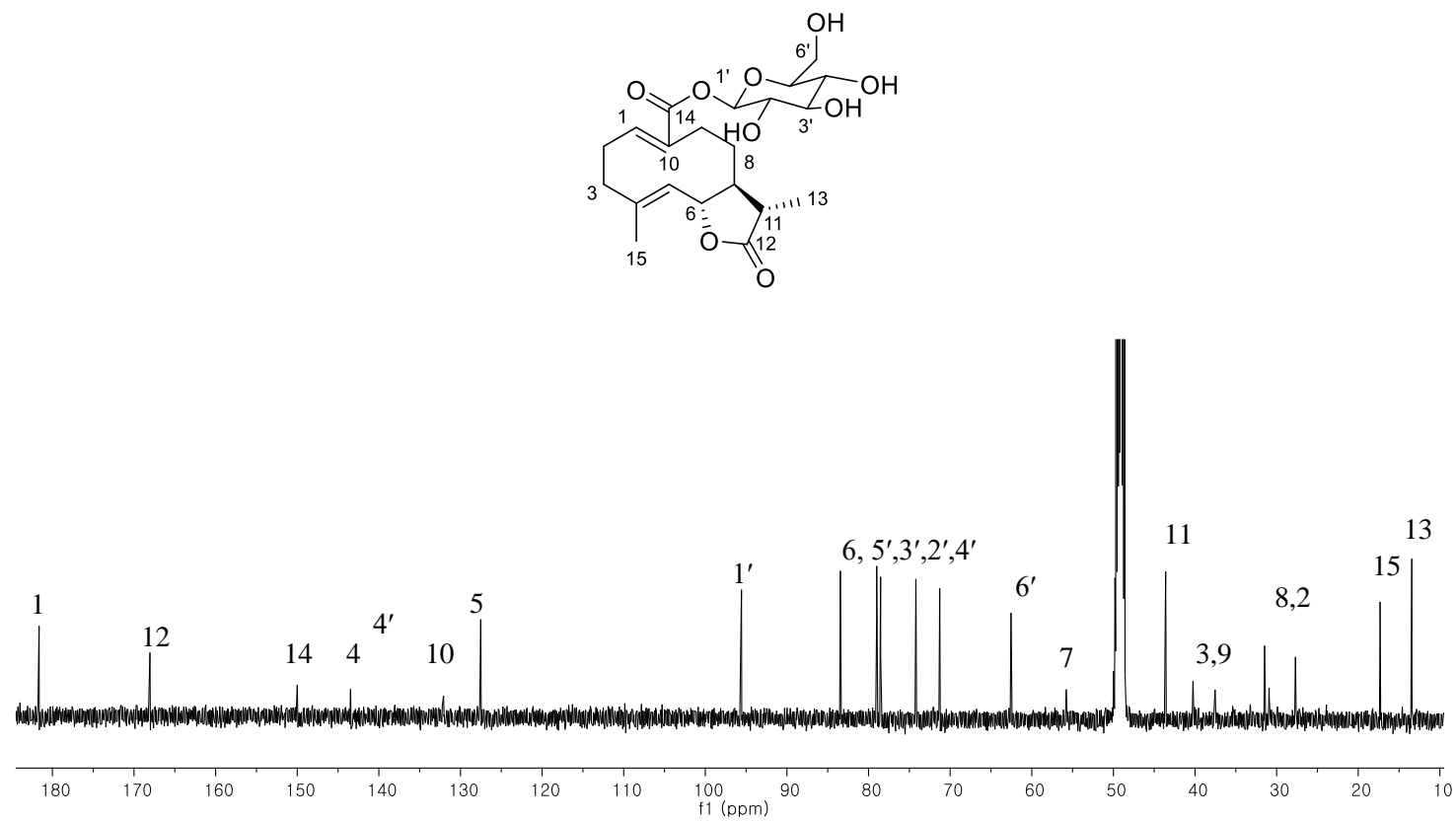


Fig. 94. ^{13}C -NMR spectrum of compound **29**

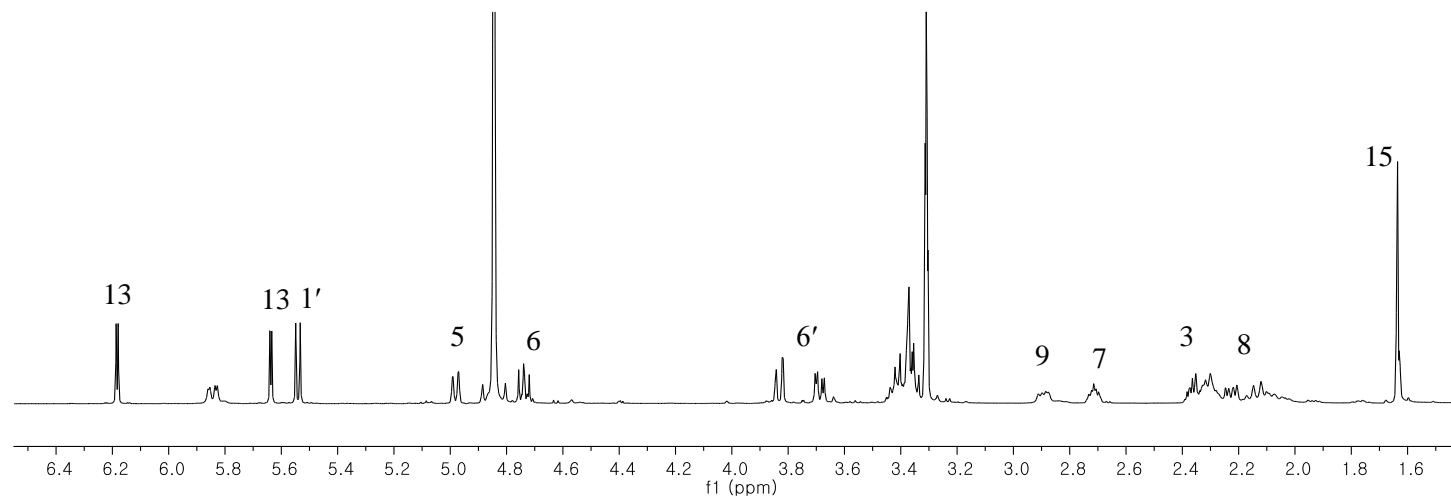
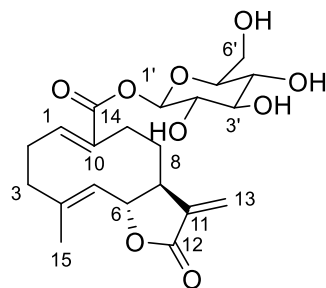


Fig. 95. ^1H -NMR spectrum of compound **30**

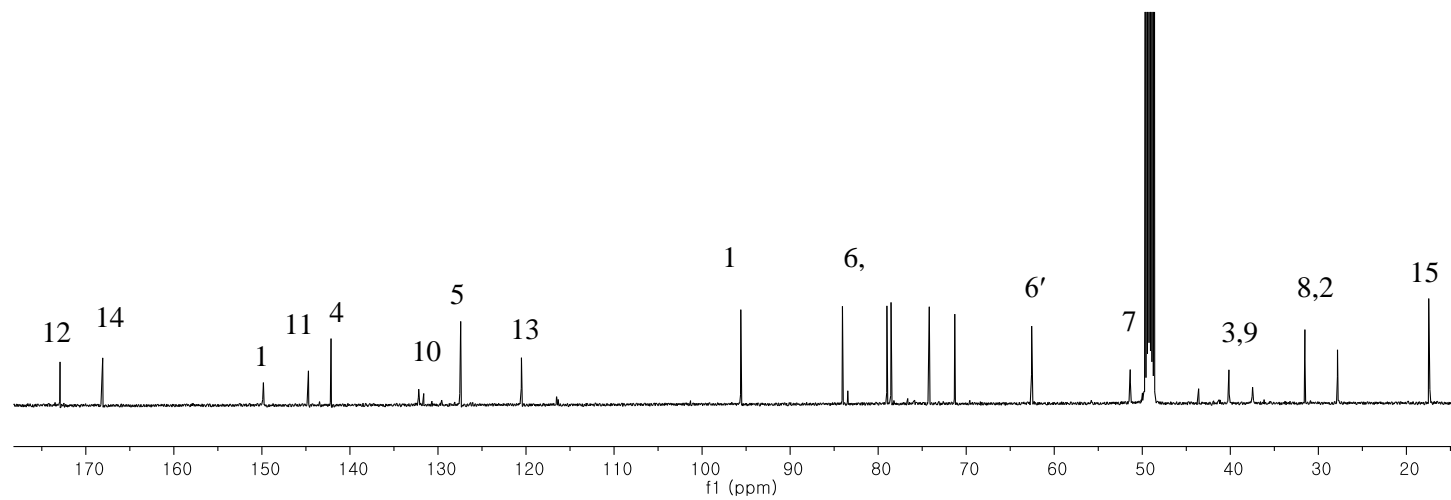
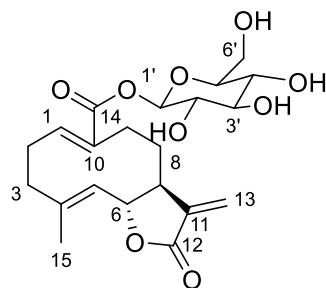


Fig. 96. ^{13}C -NMR spectrum of compound **30**

1.22 화합물 **31**의 구조

화합물 **31**는 갈색 무정형 분말로 HRESIMS m/z 451.1962 $[M + Na]^+$ (calcd. for $C_{21}H_{32}O_9Na$, 451.1944)를 통해 분자식 $C_{21}H_{32}O_9$ 을 얻었다. 1H NMR spectrum에서 두 개의 aromatic proton [δ_H 5.99 (1H, d, $J = 3.2$ Hz), 5.48 (1H, d, $J = 3.2$ Hz)], anomeric proton [δ_H 4.33 (1H, d, $J = 7.8$ Hz)], 세 개의 oxygenated 피크 [δ_H 4.16 (1H, t, $J = 11.1$ Hz), 3.77 (1H, m), 3.55 (1H, dd, $J = 11.7, 4.0$ Hz)], 아홉 개의 methine 피크 [δ_H 2.54 (1H, td, $J = 11.3, 3.1$ Hz), 2.33 (1H, dd, $J = 12.4, 5.2$ Hz), 2.06 (1H, m), 2.04 (1H, m), 1.98 (1H, m), 1.77 (1H, q, $J = 12.2$ Hz), 1.63 (1H, dd, $J = 11.5, 4.4$ Hz), 1.55 (1H, dd, $J = 12.7, 2.7$ Hz), 1.33 (1H, m)] 그리고 두 개의 methyl기 [δ_H 1.06 (3H, s), 1.00 (3H, d, $J = 7.5$ Hz)]를 보였다.

^{13}C NMR spectrum에서 carbonyl기 (δ_C 173.0), 두 개의 aromatic carbon (δ_C 142.0, 117.2), anomeric carbon (δ_C 101.9), 아홉 개의 oxygenated carbon (δ_C 84.0, 81.7, 78.3, 78.0, 75.1, 71.9, 71.5, 62.1, 52.2), 다섯 개의 methine carbon (δ_C 49.4, 42.1, 40.5, 35.6, 31.8) 그리고 두 개의 methyl carbon (δ_C 16.4, 9.5)을 보였다. 이상의 결과에서 15 + 6개의 carbon피크를 통해 하나의 sesquiterpene 구조와 glucose의 존재를 추정할 수 있으며, 문헌치와의 비교를 통해 화합물 **31**을 3β -hydroxy-4 α H-3-dihydrosantamarine- β -D-glucopyranoside으로 동정하였다 (Zidorn et al., 1999).

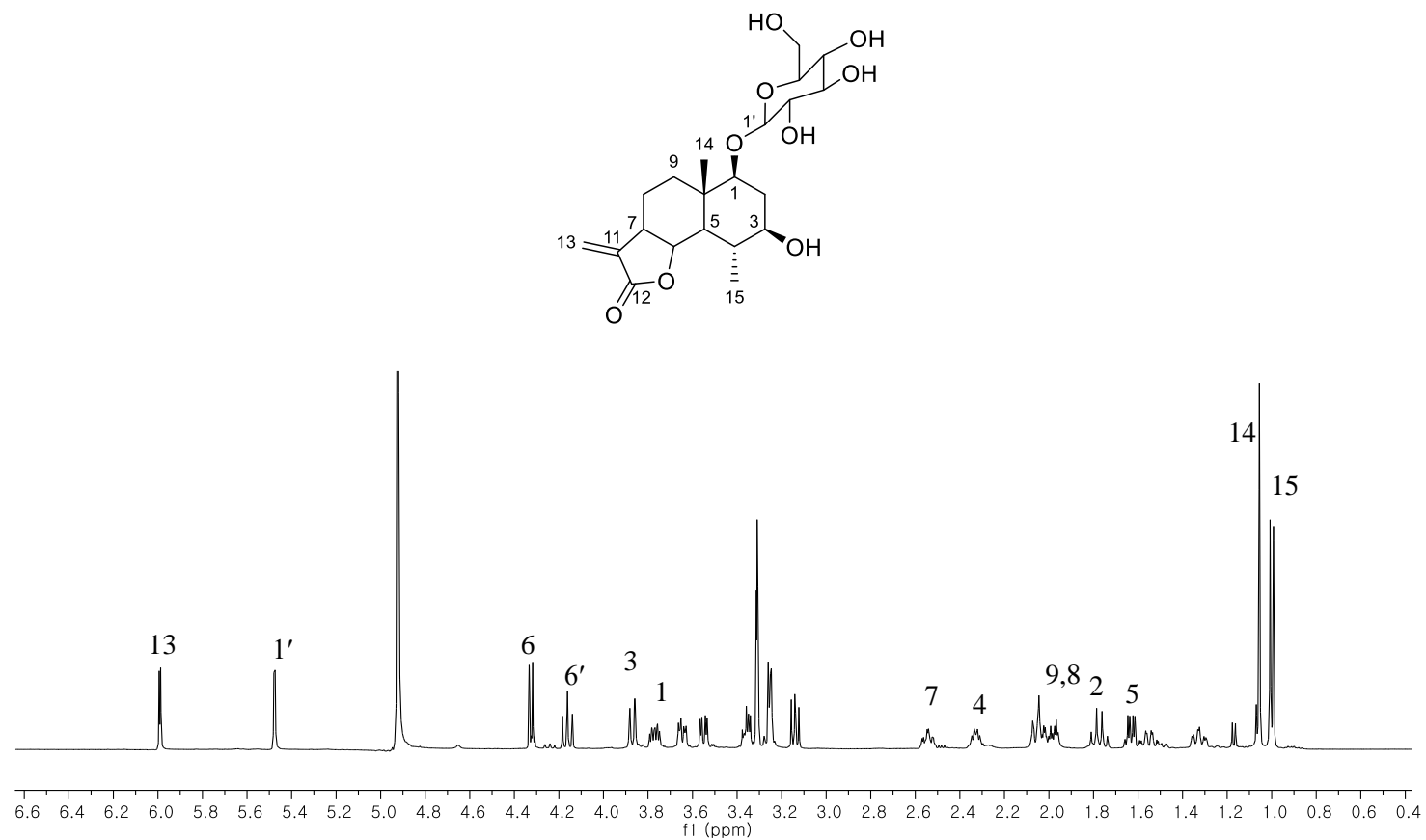


Fig. 97. ^1H -NMR spectrum of compound **31**

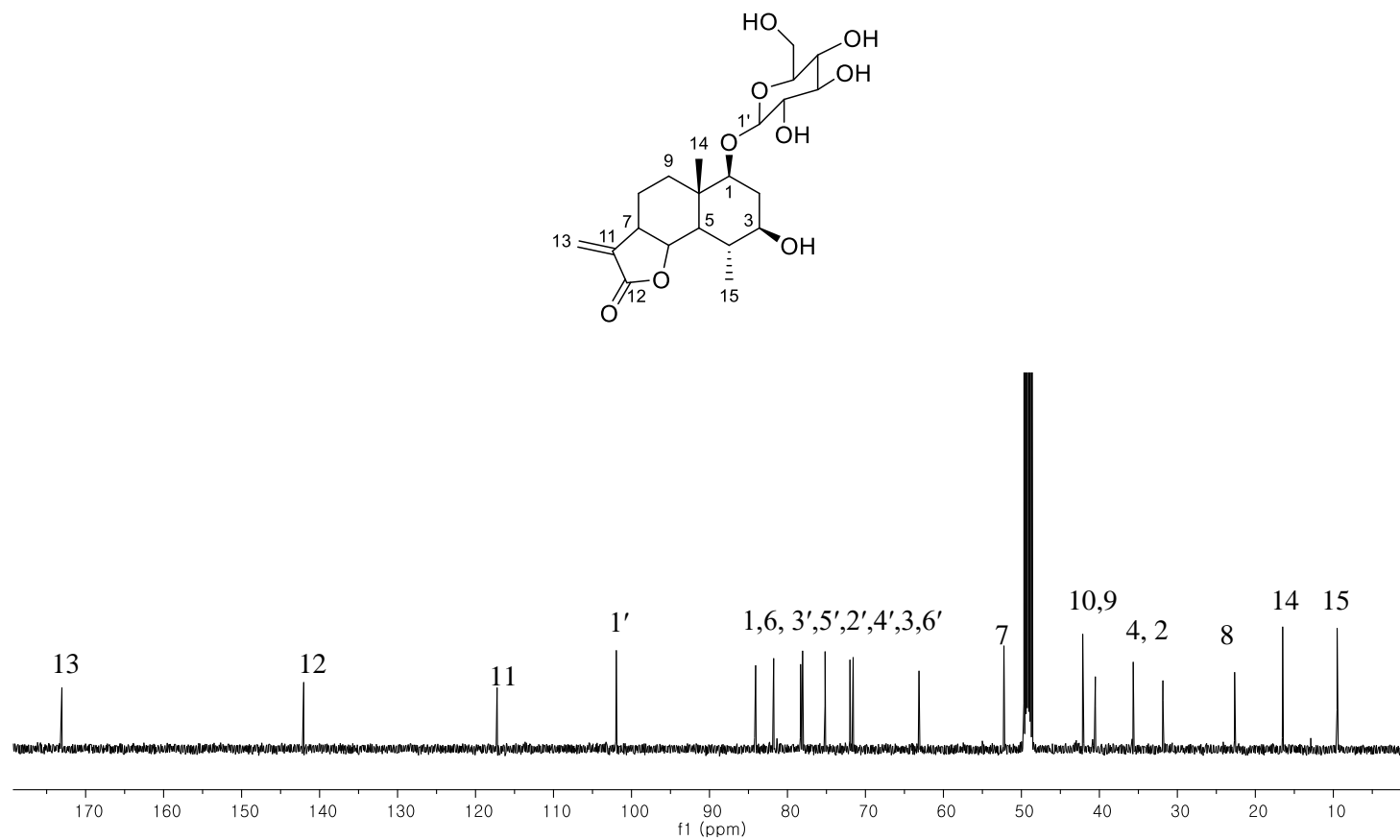


Fig. 98. ^{13}C -NMR spectrum of compound **31**

1.23 화합물 **32**, **33**의 구조

화합물 **32** 는 무색무정형 화합물로서 분자식이 $C_{13}H_{20}O_3$ 이다 [m/z 225.1486 $[M-H]^+$ (calcd. for $C_{13}H_{21}O_3$ 225.1491)]. 1H NMR spectrum 에서 두 개의 aromatic proton [δ_H 7.17 (1H, d, $J = 15.8$ Hz), 6.18 (1H, d, $J = 15.8$ Hz)], 하나의 oxygenated proton [δ_H 3.76 (1H, m)], 네 개의 methine 피크 [δ_H 2.31 (1H, m), 1.62 (1H, dd, $J = 14.3, 9.2$ Hz), 1.58 (1H, ddd, $J = 12.8, 3.2, 1.7$ Hz), 1.26 (1H, dd, $J = 9.8, 2.9$ Hz)] 그리고 네 개의 methyl 기 [δ_H 2.28 (3H, s), 1.19 (3H, s), 1.18 (3H, s), 0.96 (3H, s)]를 확인할 수 있다. ^{13}C NMR spectrum 에서 ketone 기 (δ_C 200.4), 두 개의 aromatic carbon (δ_C 145.5, 133.9), 세 개의 oxygenated carbon (δ_C 71.0, 68.9, 64.5), 세 개의 methylene carbon (δ_C 47.8, 41.4, 29.9), 4 차 탄소 (δ_C 36.2), 네 개의 methyl carbon (δ_C 47.8, 41.4, 29.9)이 보인다. 이상의 데이터와 문헌과 비교하여 화합물 **32** 를 annuionone D 로 동정하였다 (D'Abrosca et al., 2004).

화합물 **33** 은 무색무정형 화합물로 분자식이 $C_{13}H_{20}O_3$ 이다
 $[m/z\ 225.1491\ [M+H]^+]$ (calcd. for $C_{13}H_{21}O_3$, 225.1491). 1H NMR spectrum 에서
 한 쌍의 aromatic proton [δ_H 7.28 (1H, d, $J = 16.4$ Hz), 6.15 (1H, d, $J = 16.4$ Hz)],
 두 개의 oxygenated proton [δ_H 3.88 (1H, d, $J = 3.5$ Hz), 3.79 (1H, m)],
 methylene 피크 [δ_H 1.82 (1H, d, $J = 12.6$ Hz), 1.48 (1H, dd, $J = 12.4, 2.4$ Hz)],
 네 개의 methyl 기 [2.32 (3H, s), 1.88 (3H, s), 1.13 (3H, s), 1.09 (3H, s)]가
 보인다. ^{13}C NMR spectrum 에서 ketone 기 (δ_C 197.7), 두 쌍의 aromatic
 carbon (δ_C 142.5, 138.7, 134.3, 133.7), 두 개의 oxygenated carbon (δ_C 71.9,
 66.8), methylene carbon (δ_C 42.4), 4 차 탄소 하나 (δ_C 37.0) 그리고 네 개의
 methyl 기 (δ_C 30.0, 27.6, 27.4, 20.2)를 확인하였다. 이상의 데이터와
 문헌치와 비교하여 화합물 **33** 을 3,4-dihydroxy-5,7-megastigmadien-
 9-one 으로 동정하였다 (Xie et al., 2005).

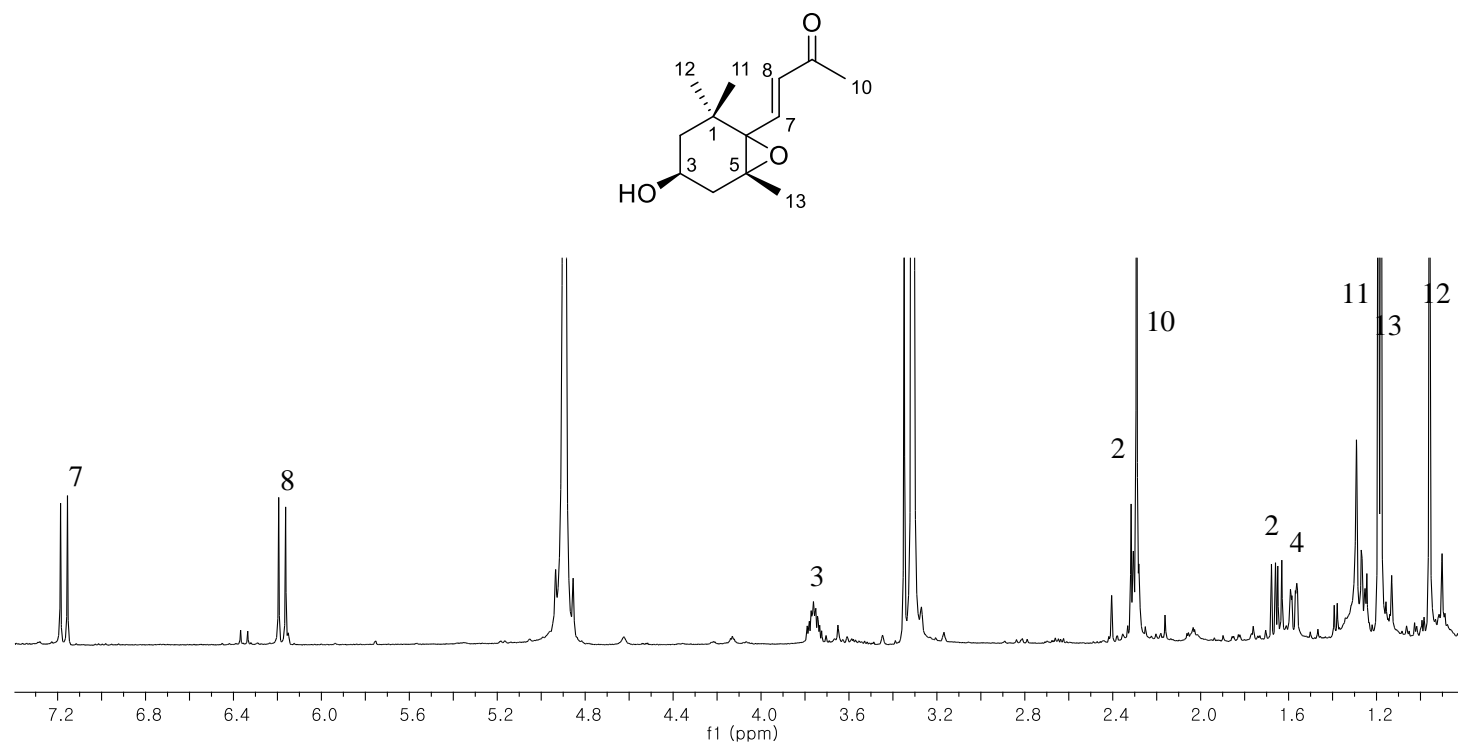


Fig. 99. ^1H -NMR spectrum of compound **32**

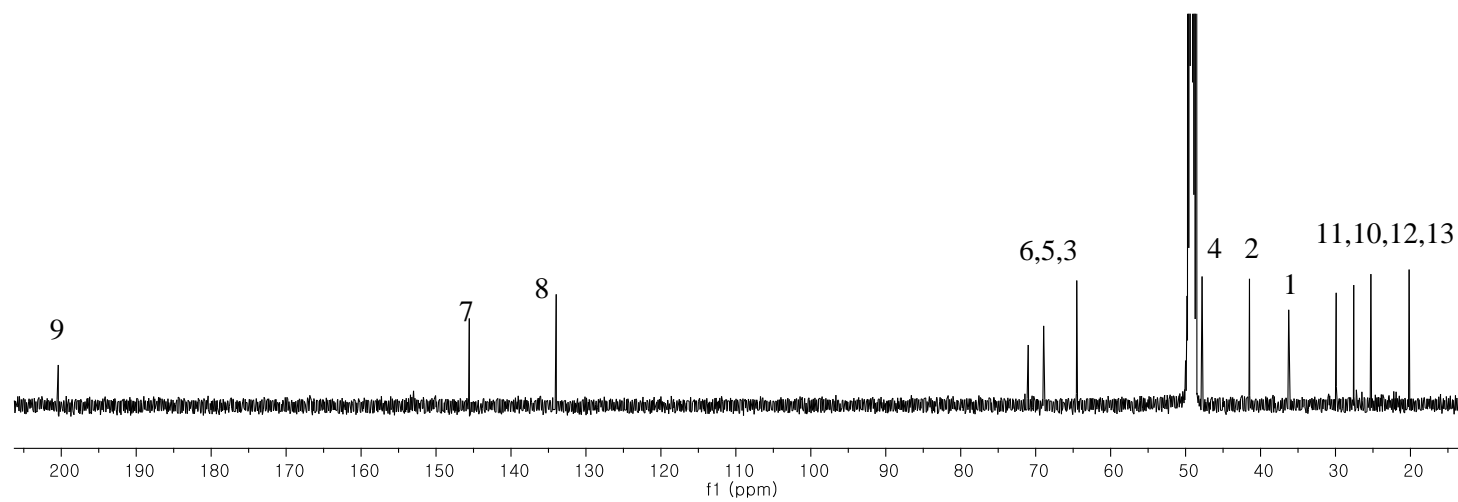
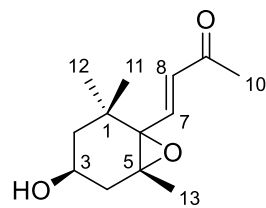


Fig. 100. ^{13}C -NMR spectrum of compound **32**

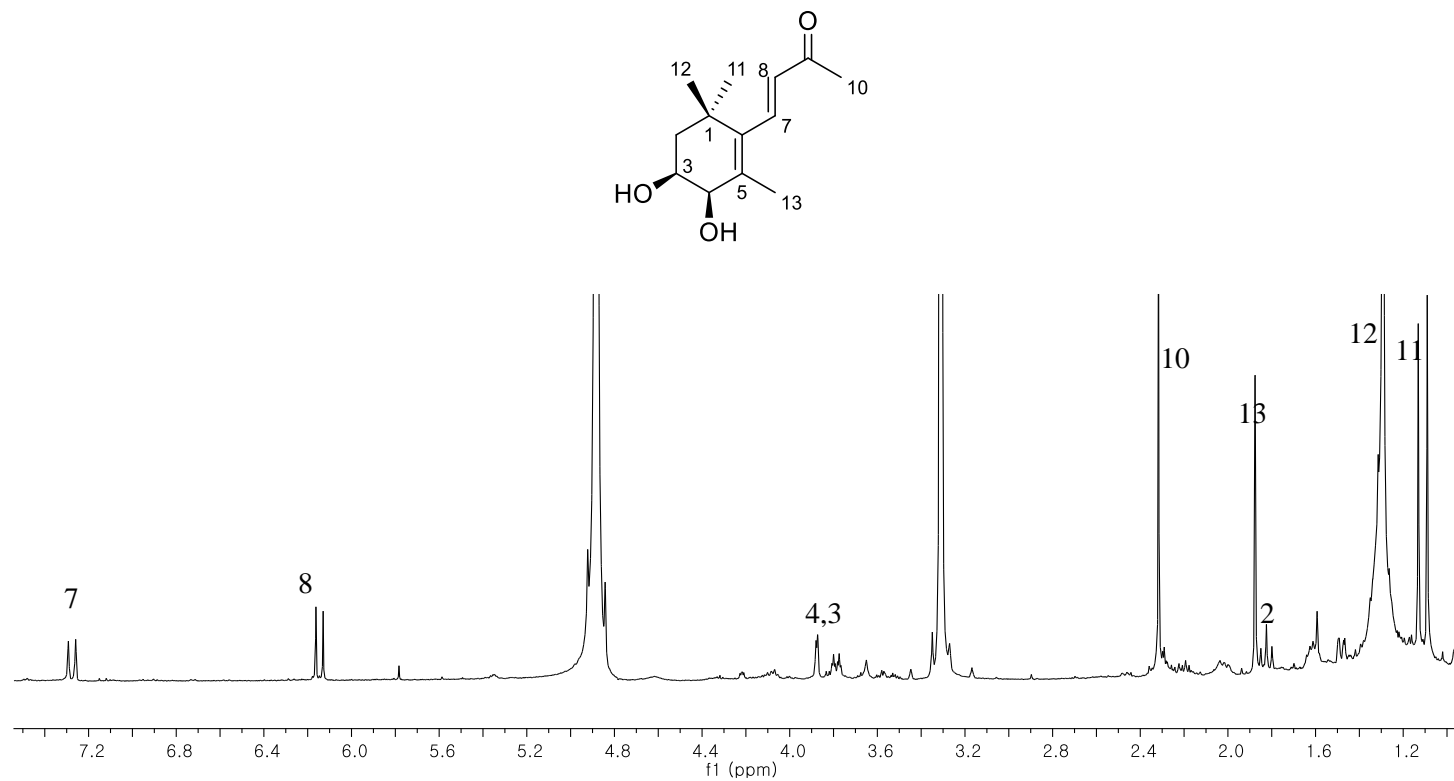


Fig. 101. ¹H-NMR spectrum of compound **33**

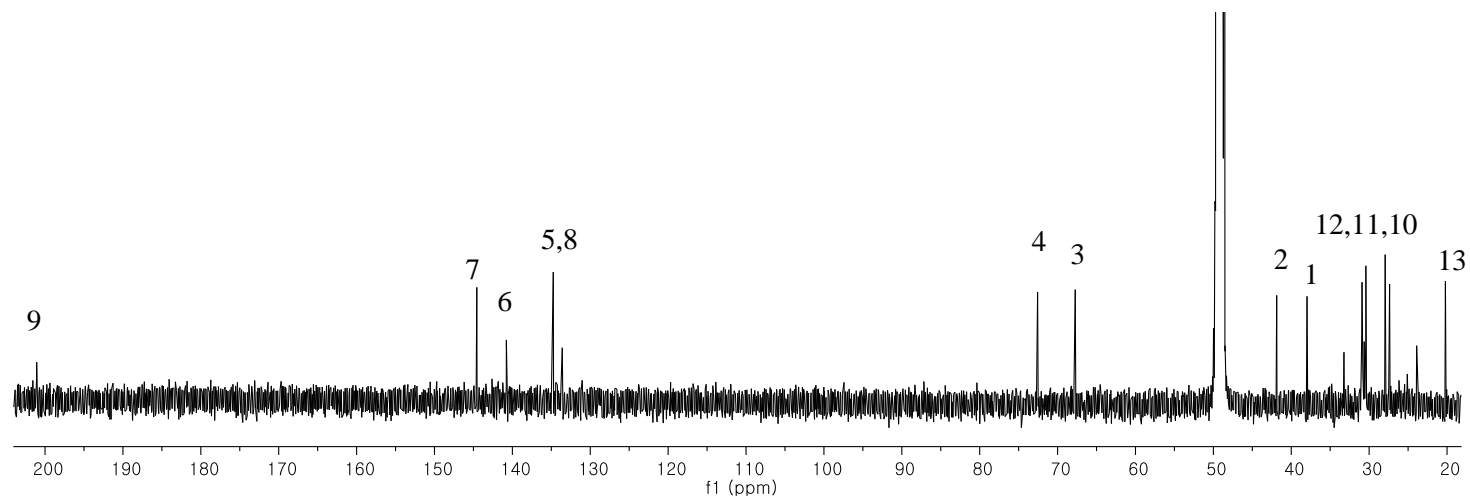
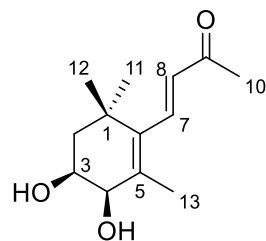


Fig. 102. ^{13}C -NMR spectrum of compound **33**

1.24 화합물 **34**, **35**, **36**의 구조

화합물 **34**는 무색무정형 분말 형태이며 HRESIMS [m/z 409.1852 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{19}H_{30}O_8Na$, 409.1838)]를 통해 분자식 $C_{19}H_{30}O_8$ 을 구하였다. NMR spectra가 화합물 **33**과 거의 유사하며 1D NMR spectra에서 ketone기 (δ_C 197.7) 하나, 두 쌍의 aromatic group [δ_C/δ_H 144.3/7.28 (1H, d, $J = 16.4$ Hz), 141.4, 134.8/6.14 (1H, d, $J = 16.4$ Hz), 132.5], 두 개의 oxygenated signal [δ_C/δ_H 75.8/4.02 (1H, dt, $J = 12.8, 3.5$ Hz), 70.1/4.13 (1H, d, $J = 3.4$ Hz)], 4차 carbon 하나 (δ_C 37.0), methylene group 하나 [δ_C/δ_H 40.2/1.94 (1H, d, $J = 12.6$ Hz), 1.65 (1H, dd, $J = 12.4, 3.2$ Hz)], 네 개의 methyl기 [δ_C/δ_H 30.0/1.15 (3H, s), 27.9/2.32 (3H, s), 27.3/1.10 (3H, s), 20.2/1.89 (3H, s)]로 3,4-dihydroxy-5,7-megastigmadien-9-one 부분구조를 동정하였고, anomeric signal [δ_C 102.9/ δ_H 4.51 (1H, d, $J = 7.8$ Hz)] 과 다섯 개의 carbon 피크로 (δ_C 78.2, 78.1, 75.4, 71.7, 62.8), 하나의 glucose가 존재하는 것을 알 수 있다. 문헌과의 비교로 화합물 **34**를 komaroveside A로 동정하였다 (Lee et al., 2011).

화합물 **35**와 **36**은 무색 무정형 분말 형태이며 분자식이 모두 $C_{19}H_{30}O_8$ 이다 [35: m/z 409.1858 $[M+Na]^+$, 36: m/z 409.1851 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{19}H_{30}O_8Na$, 409.1838)]. **35**의 1H NMR spectrum에서 두 개의 aromatic proton [δ_H 5.87 (1H, m), 5.86 (2H, m)], anomeric proton [δ_H 4.34 (1H, d, $J = 7.8$ Hz)], oxygenated proton 하나 [δ_H 4.42 (1H, m)], 두 개의 methylene proton [δ_H 2.53 (1H, d, $J = 17.0$ Hz), 2.15 (1H, dd, $J = 17.0$ Hz)] 그리고 네 개의 methyl기

[δ_{H} 1.29 (3H, d, $J = 6.4$ Hz), 1.03 (3H, s), 1.04 (3H, s), 1.92 (3H, d, $J = 1.2$ Hz)]를 확인하였다. ^{13}C NMR spectrum에서 ketone기 (δ_{C} 201.3), 네 개의 aromatic carbon (δ_{C} 167.4, 135.4, 131.6, 127.3), anomeric carbon (δ_{C} 102.8), 일곱 개의 oxygenated carbon (δ_{C} 80.1, 78.2, 78.1, 77.4, 75.3, 71.7, 62.9), 두 개의 methine 기 (δ_{C} 50.8, 42.5) 그리고 네 개의 methyl기 (δ_{C} 24.8, 23.5, 21.3, 19.7)를 확인할 수 있다. 문헌 치와의 비교를 통해 구조를 roseoside로 동정하였다 (Andersson and Lundgren, 1988). **36**의 NMR spectra는 **35**와 거의 유사하며, methyl기의 chemical shift만 약간 차이가 있다 (δ_{C} 24.8, 23.5, 22.4, 19.7). 6번 위치의 절대구조는 CD spectrum을 통해 동정할 수 있는데, **35**, **36** 둘 다 245 nm에서 positive cotton effect를 보이므로 *S*로 동정하였다 (Yamano and Ito, 2005). 이상의 결과로 화합물 **35**를 6*S*,9*R*-roseoside, **36**를 6*S*,9*S*-roseoside로 동정하였다.

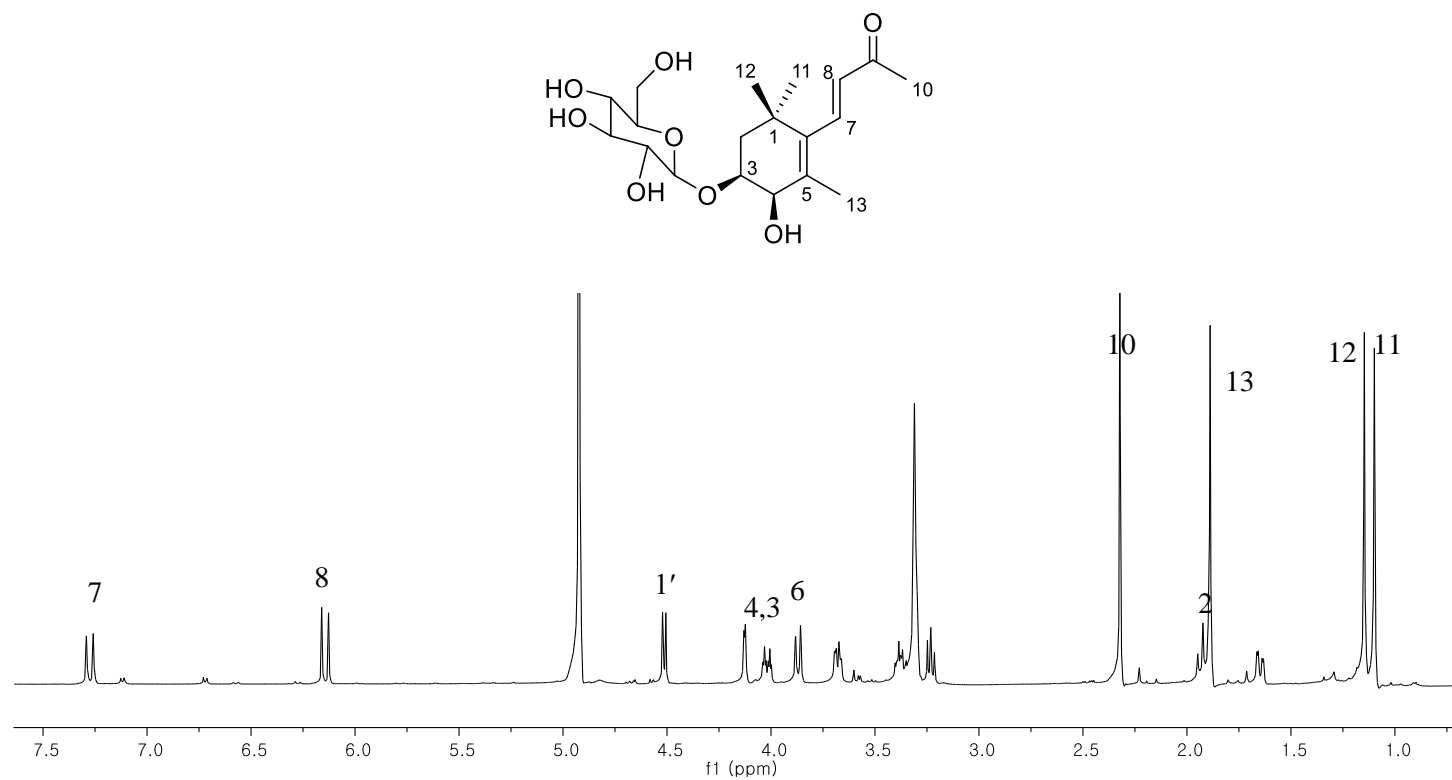


Fig. 103. ^1H -NMR spectrum of compound **34**

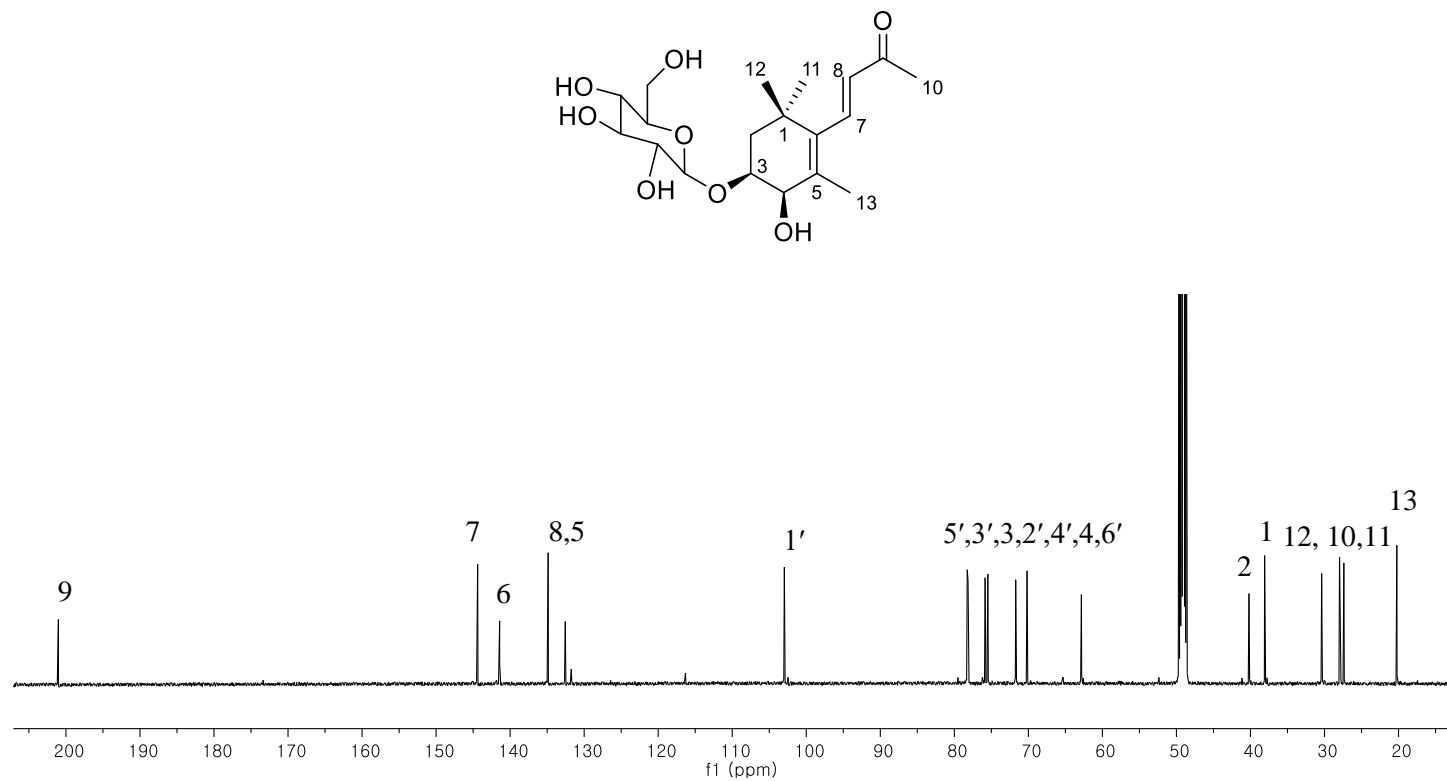


Fig. 104. ^{13}C -NMR spectrum of compound **34**

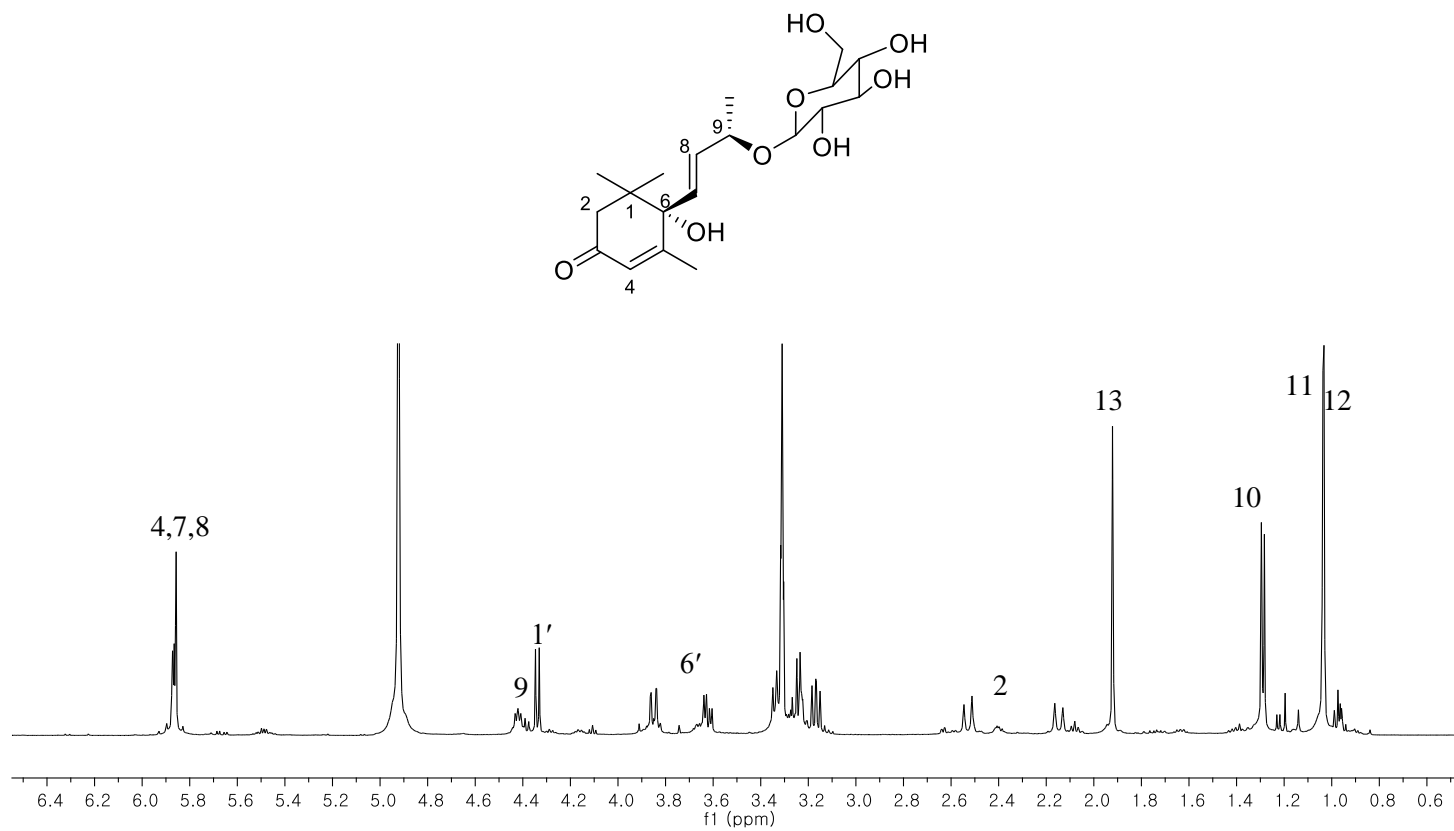


Fig. 105. ^1H -NMR spectrum of compound **35**

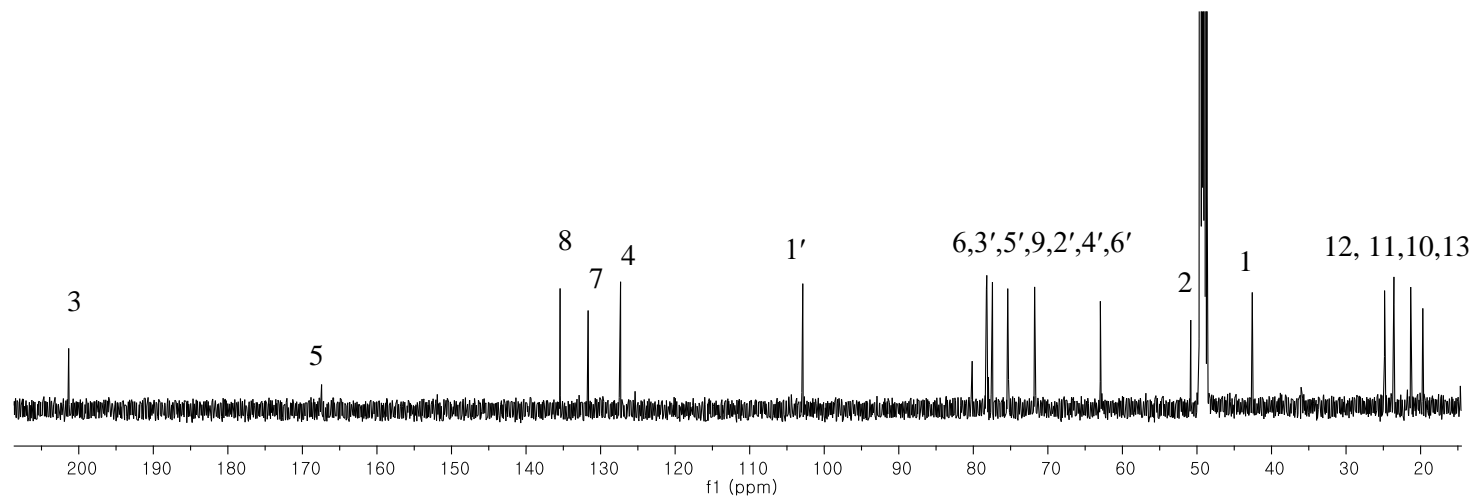
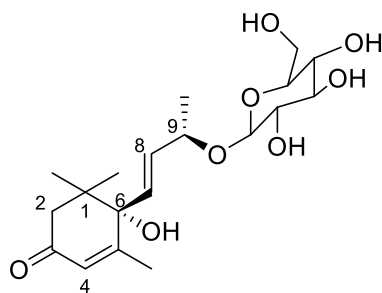


Fig. 106. ^{13}C -NMR spectrum of compound **35**

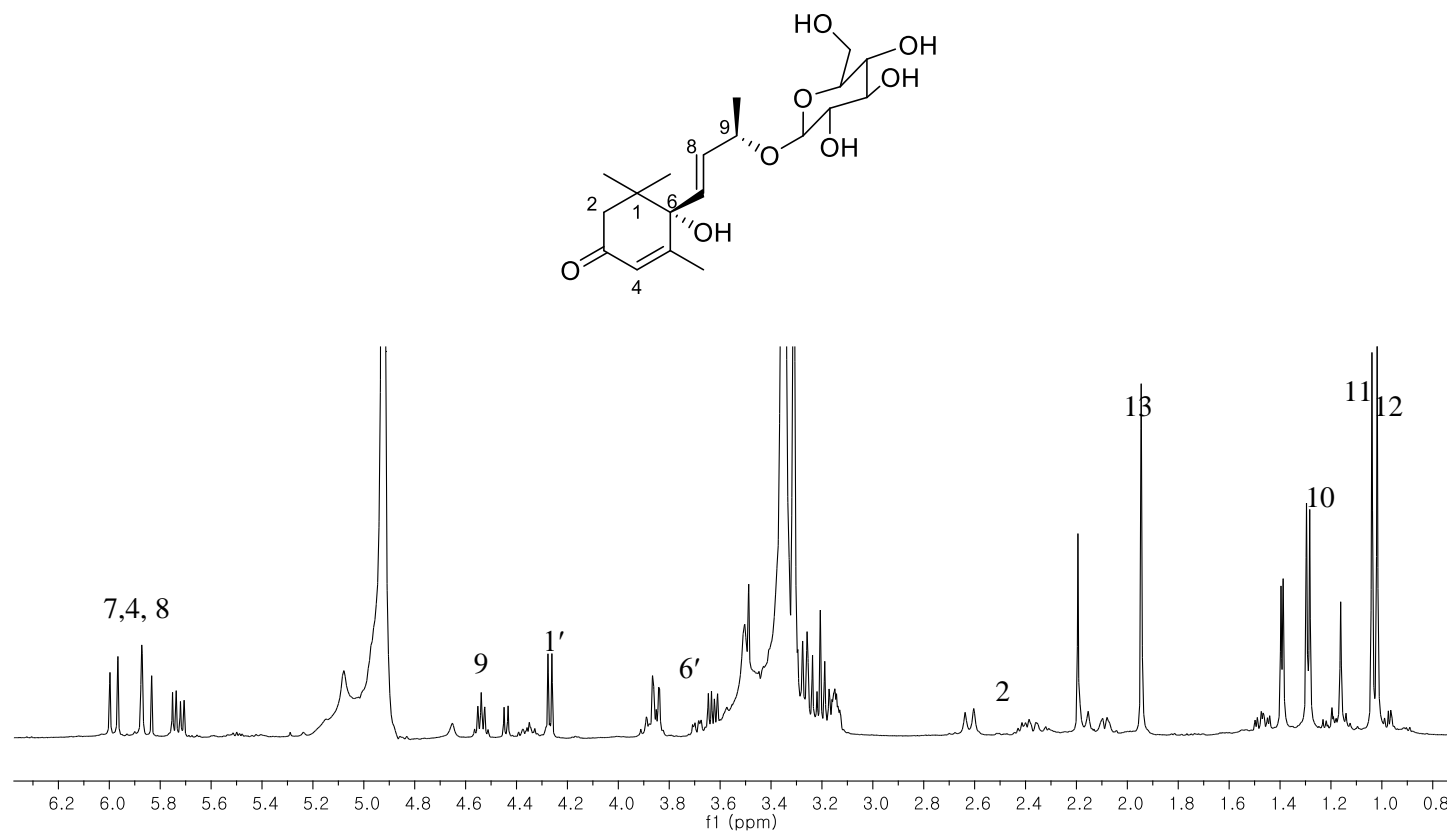


Fig. 107. ^1H -NMR spectrum of compound **36**

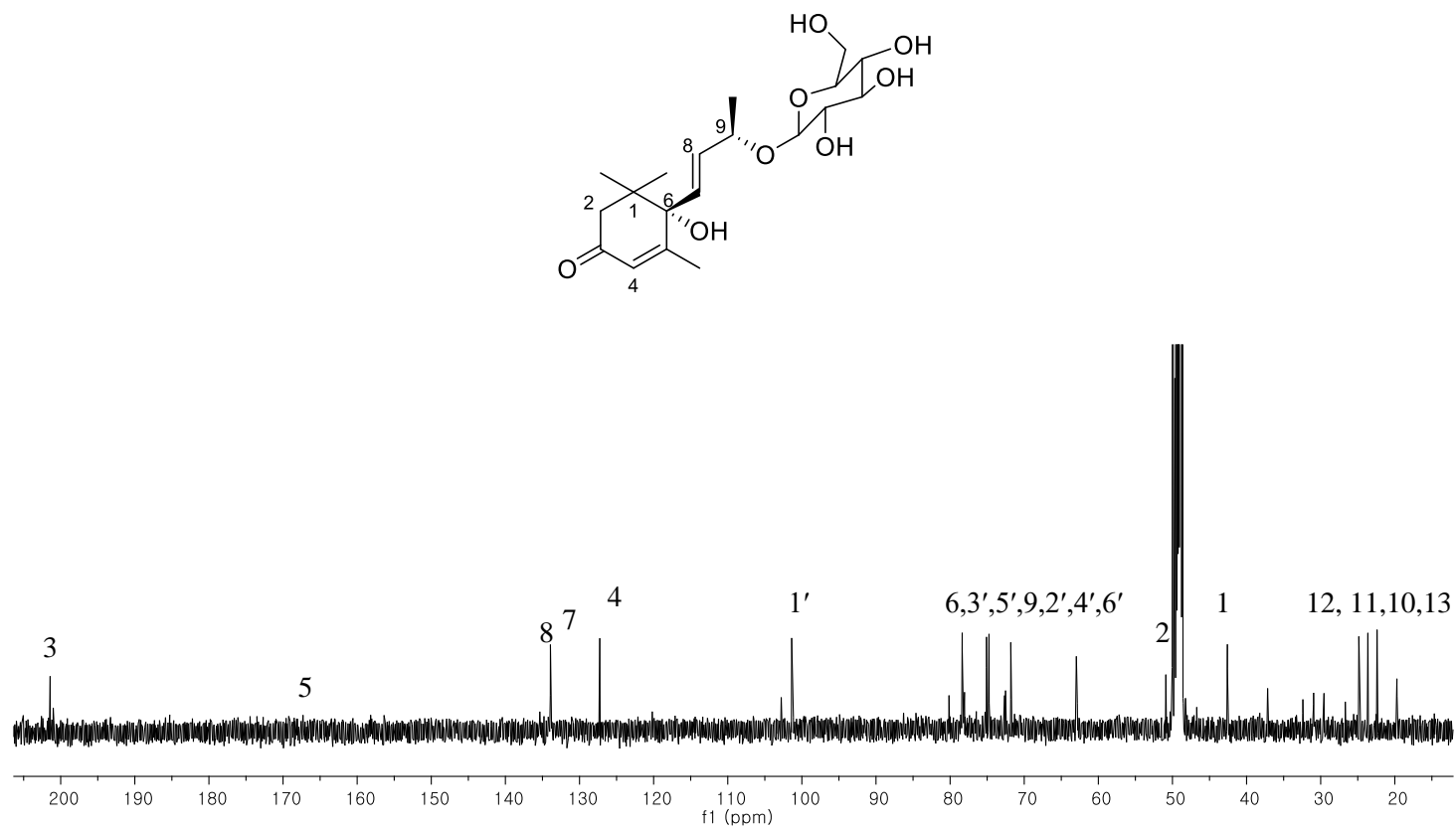


Fig. 108. ^{13}C -NMR spectrum of compound **36**

1.25 화합물 **37**, **48**의 구조

화합물 **37**은 무색 무정형 분말이며 HRMS값 [m/z 195.0650 $[M+H]^+$ (calcd. for $C_{10}H_{11}O_4$, 195.0657)]을 통해 분자식 $C_{10}H_{10}O_4$ 을 동정하였다. 1H NMR spectrum에서 δ_H 7.03 (1H, d, $J = 1.5$ Hz), 6.94 (1H, dd, $J = 8.1, 1.5$ Hz), 6.77 (1H, d, $J = 8.1$ Hz), 7.54 (1H, d, $J = 15.9$ Hz), 6.26 (1H, d, $J = 15.9$ Hz), 3.76 (3H, s)를 통해서 하나의 1,3,4-치환체, 하나의 double bond, methoxyl기 하나의 존재를 알 수 있다. ^{13}C NMR spectrum에서 δ_C 169.9, 149.7, 147.0, 146.9, 127.8, 123.0, 116.6, 115.2, 114.9을 통해 cinnamic acid와 methoxyl기 (δ_C 52.1)를 확인할 수 있다. 이상의 데이터와 문헌과 비교를 통해 화합물 **37**을 methyl 3,4-dihydroxycinnamate로 동정하였다 (Lee et al., 2013).

화합물 **48**은 갈색 분말로서 분자식 $C_9H_9O_3$ 을 갖는다 [m/z 127.3090 $[M+H]^+$ (calcd. for $C_9H_{10}O_3$, 127.3095)]. 1D NMR spectra에서 하나의 aldehyde기 [δ_C/δ_H 179.59/9.54 (1H, s)], 네 개의 aromatic signal [δ_C/δ_H 163.3/154.0, 124.8/7.39 (1H, d, $J = 3.6$ Hz), 111.0/6.59 (1H, d, $J = 3.6$ Hz)] 그리고 oxygenated methylene기 하나 [δ_C/δ_H 57.8/4.61 (2H, s)]가 보인다. 문헌치와의 비교를 통해 **48**을 5-(hydroxymethyl) furfural로 동정하였다 (Yan et al., 2015).

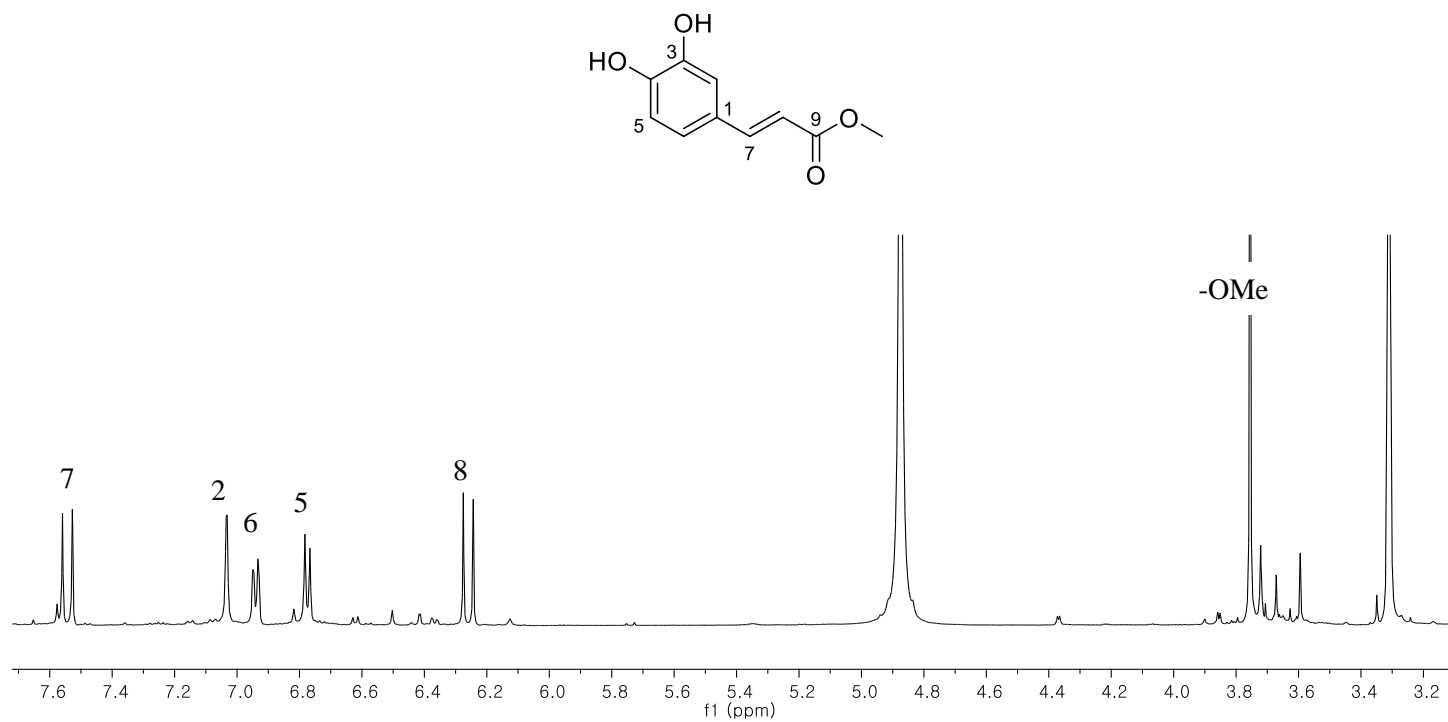


Fig. 109. ^1H -NMR spectrum of compound **37**

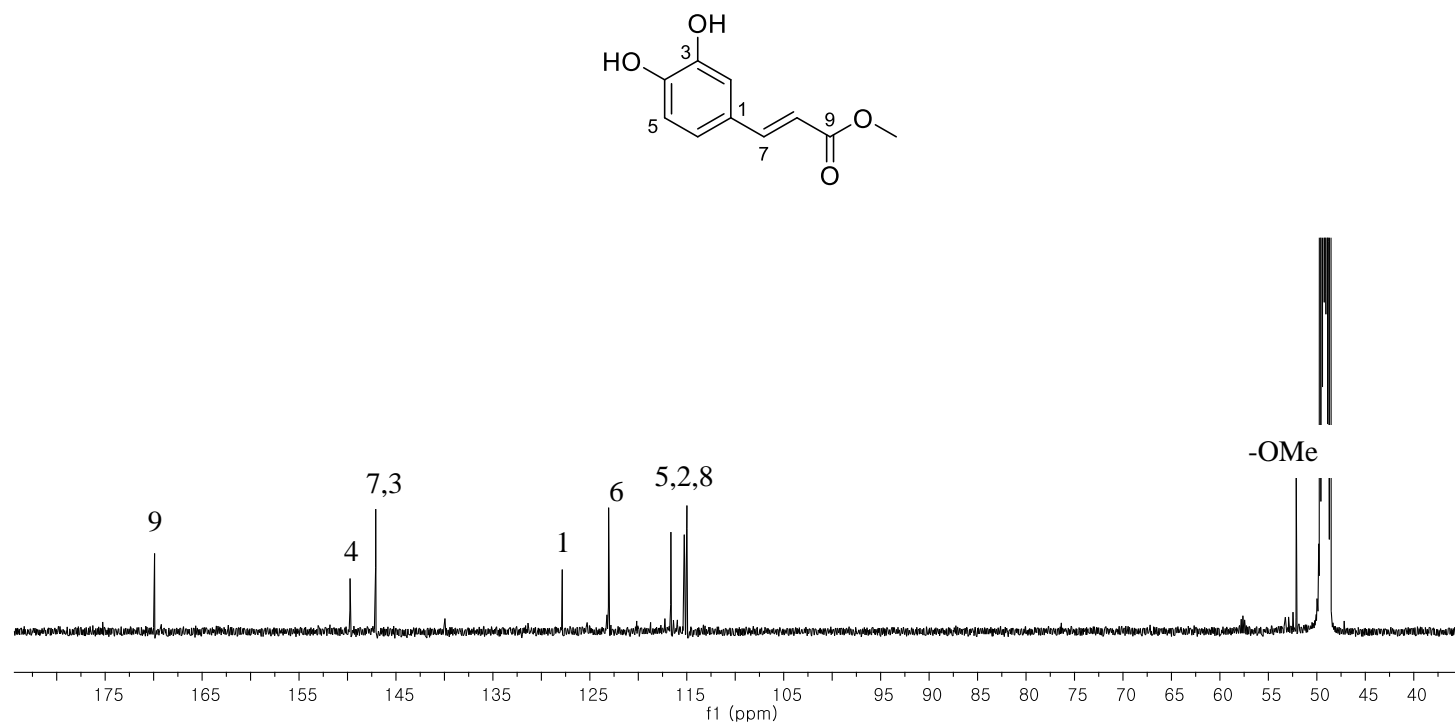


Fig. 110. ^{13}C -NMR spectrum of compound **37**

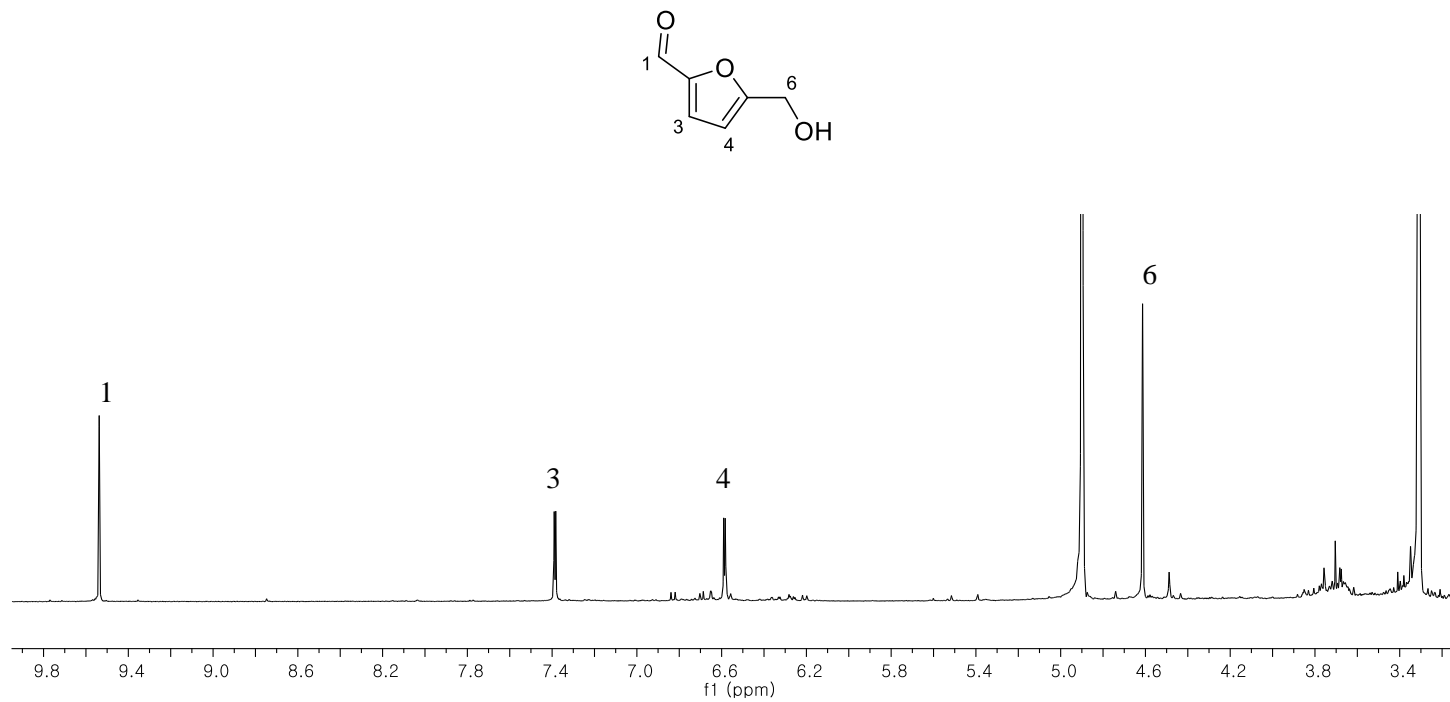


Fig. 111. ^1H -NMR spectrum of compound **48**

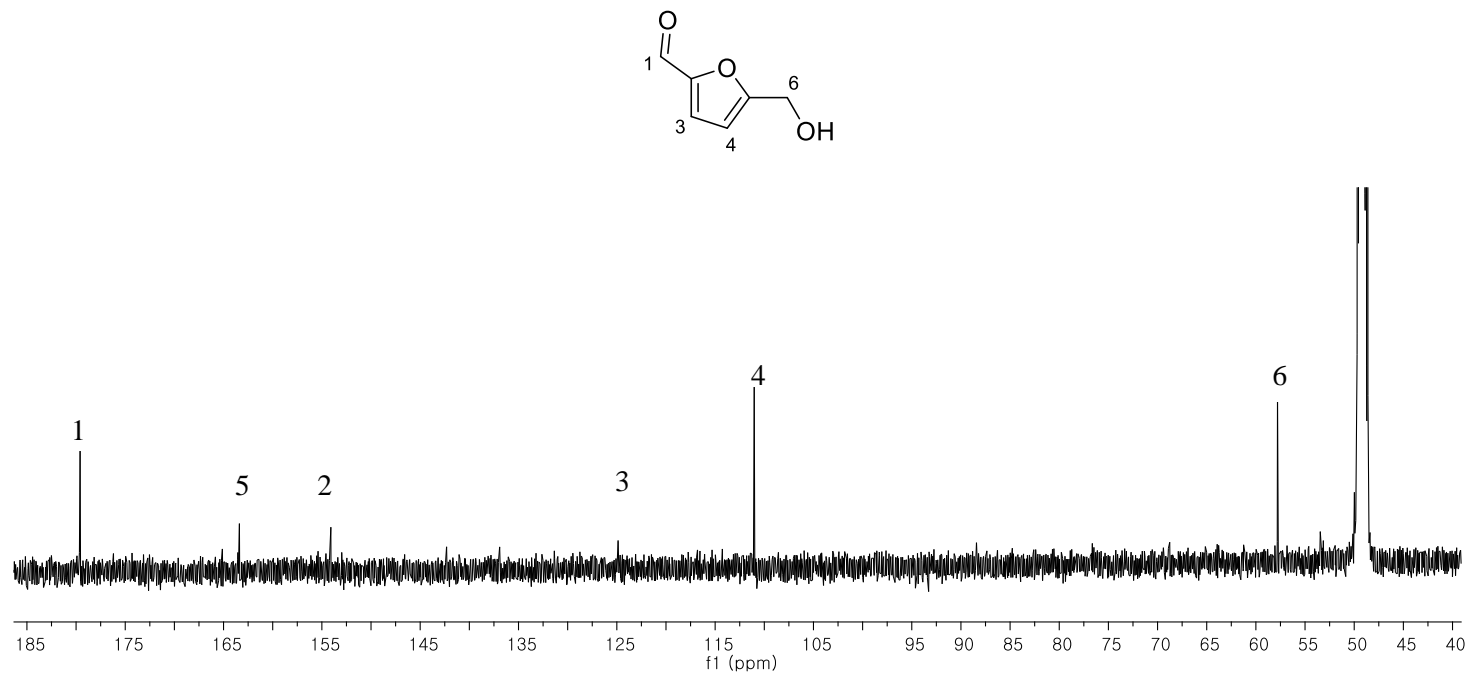


Fig. 112. ^{13}C -NMR spectrum of compound **48**

1.26 화합물 **39**, **40**의 구조

화합물 **39**과 **40**은 갈색무정형 형태로 각각의 HRESIMS [**39**: m/z 241.1082 $[M+HCOO]^-$ (calcd. for $C_{12}H_{17}O_5$, 241.1076), **40**: m/z 195.1028 $[M-H]^-$ (calcd. for $C_{11}H_{15}O_3$, 195.1021)]를 통하여 같은 분자식 $C_{11}H_{16}O_3$ 을 동정하였다. **39**의 1H NMR spectrum에서 하나의 aromatic proton [δ_H 5.75 (1H, s)], 하나의 oxygenated proton [δ_H 4.22 (1H, m)], 두 개의 methylene signal [δ_H 2.42 (1H, d, $J = 13.6$ Hz), 1.99 (1H, d, $J = 14.4$ Hz), 1.75 (1H, m), 1.53 (1H, m)] 그리고 세 개의 methyl기 [δ_H 1.76 (3H, s), 1.47 (3H, s), 1.28 (3H, s)]를 확인할 수 있다. ^{13}C NMR spectrum에서 carboxyl기 하나 (δ_C 185.8), 두 개의 aromatic carbon (δ_C 174.5, 113.4), 두 개의 oxygenated carbon (δ_C 89.1, 67.3), 세 개의 methine carbon (δ_C 48.1, 46.5, 37.3) 그리고 세 개의 methyl기 (δ_C 31.1, 27.5, 27.1)를 확인할 수 있다. 문헌치와의 비교를 통해 loliolide로 동정하였다 (Yan et al., 2013).

화합물 **40**의 NMR spectra는 **39**와 거의 유사하지만 약간의 chemical shift가 다르다. 1H NMR spectrum에서 하나의 aromatic proton [δ_H 5.78 (1H, s)], 하나의 oxygenated proton [δ_H 4.10 (1H, tt, $J = 11.5, 4.2$ Hz)], 두 개의 methylene signal [δ_H 2.47 (1H, ddd, $J = 11.7, 3.9, 2.2$ Hz), 2.01 (1H, ddd, $J = 13.0, 4.2, 2.2$ Hz), 1.42 (1H, t, $J = 11.6$ Hz), 1.28 (1H, m)] 그리고 세 개의 methyl기 [δ_H 1.59 (3H, s), 1.31 (3H, s), 1.29 (3H, s)]를, ^{13}C NMR spectrum에서는 carboxyl기 하나 (δ_C 184.0), 두 개의 aromatic carbon (δ_C 174.1, 113.8), 두 개의 oxygenated carbon (δ_C 88.7, 65.4), 세 개의 methine carbon (δ_C 50.9, 50.0, 36.3)

그리고 세 개의 methyl기 (δ_c 30.4, 25.9, 25.4)를 확인할 수 있다. 문헌과의 비교를 통해 화합물 **40**을 epilolide로 동정하였다 (Borkosky et al., 1996).

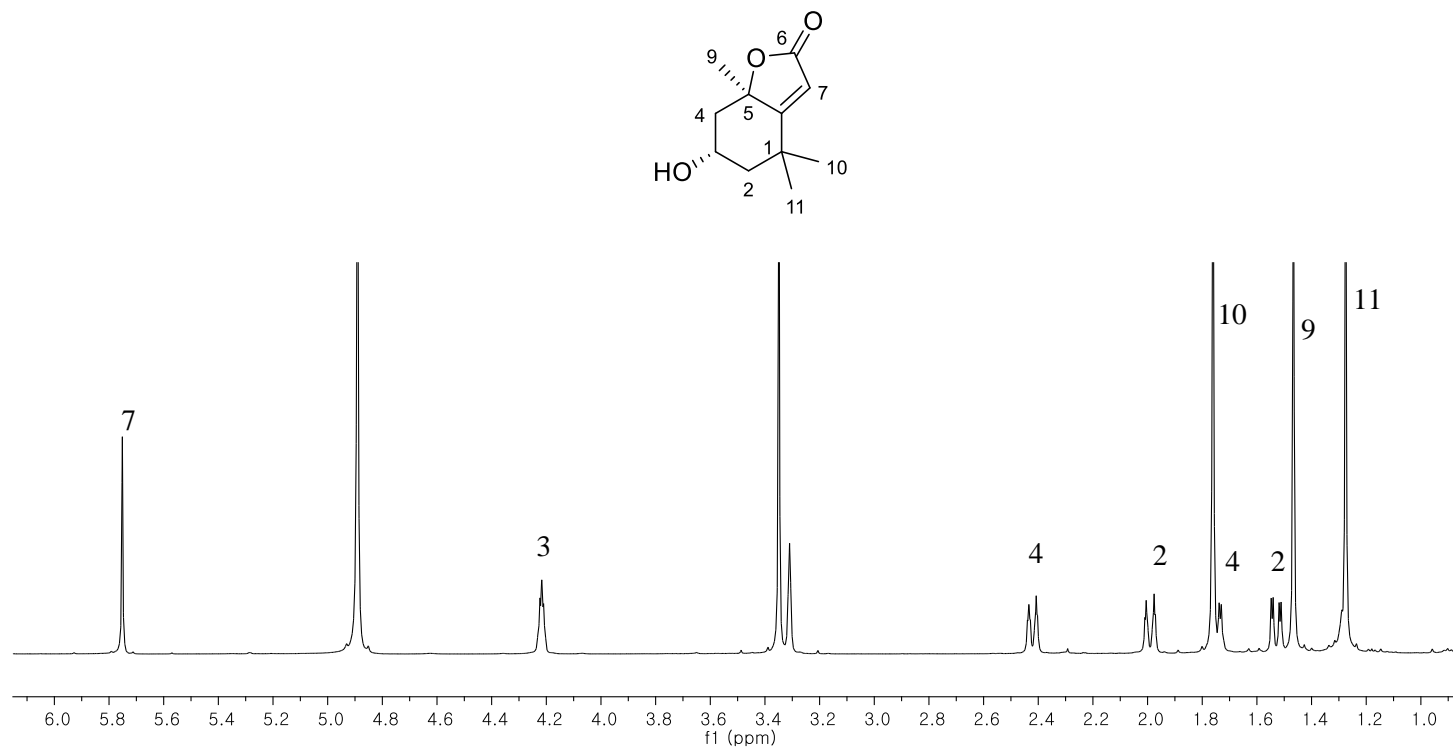


Fig. 113. ^1H -NMR spectrum of compound **39**

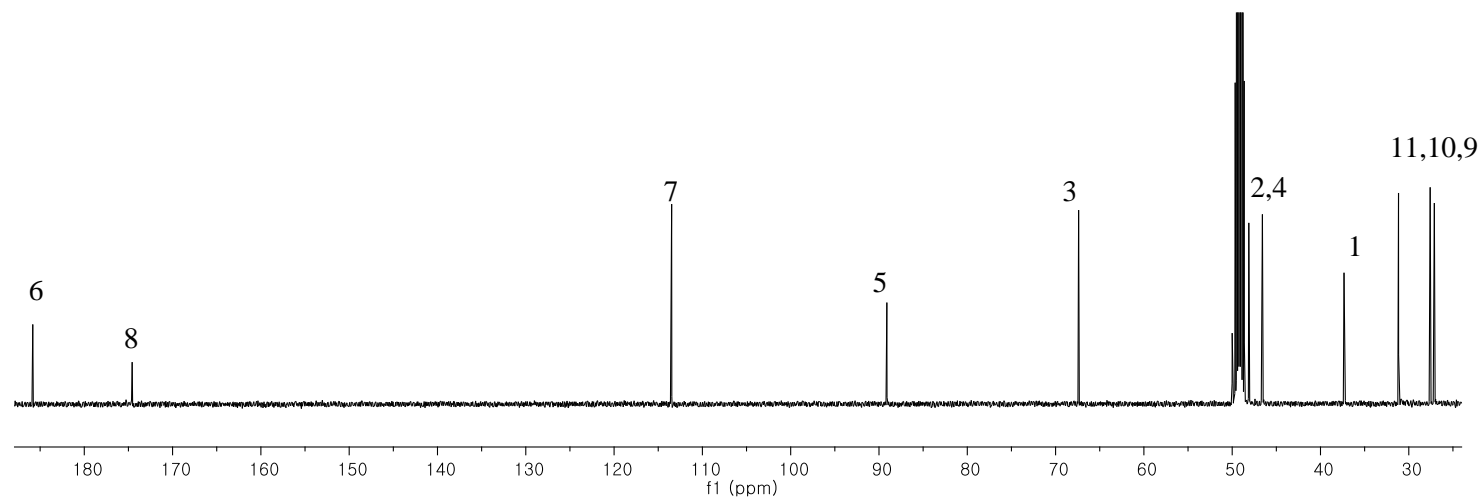
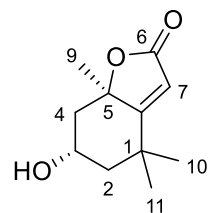


Fig. 114. ^{13}C -NMR spectrum of compound **39**

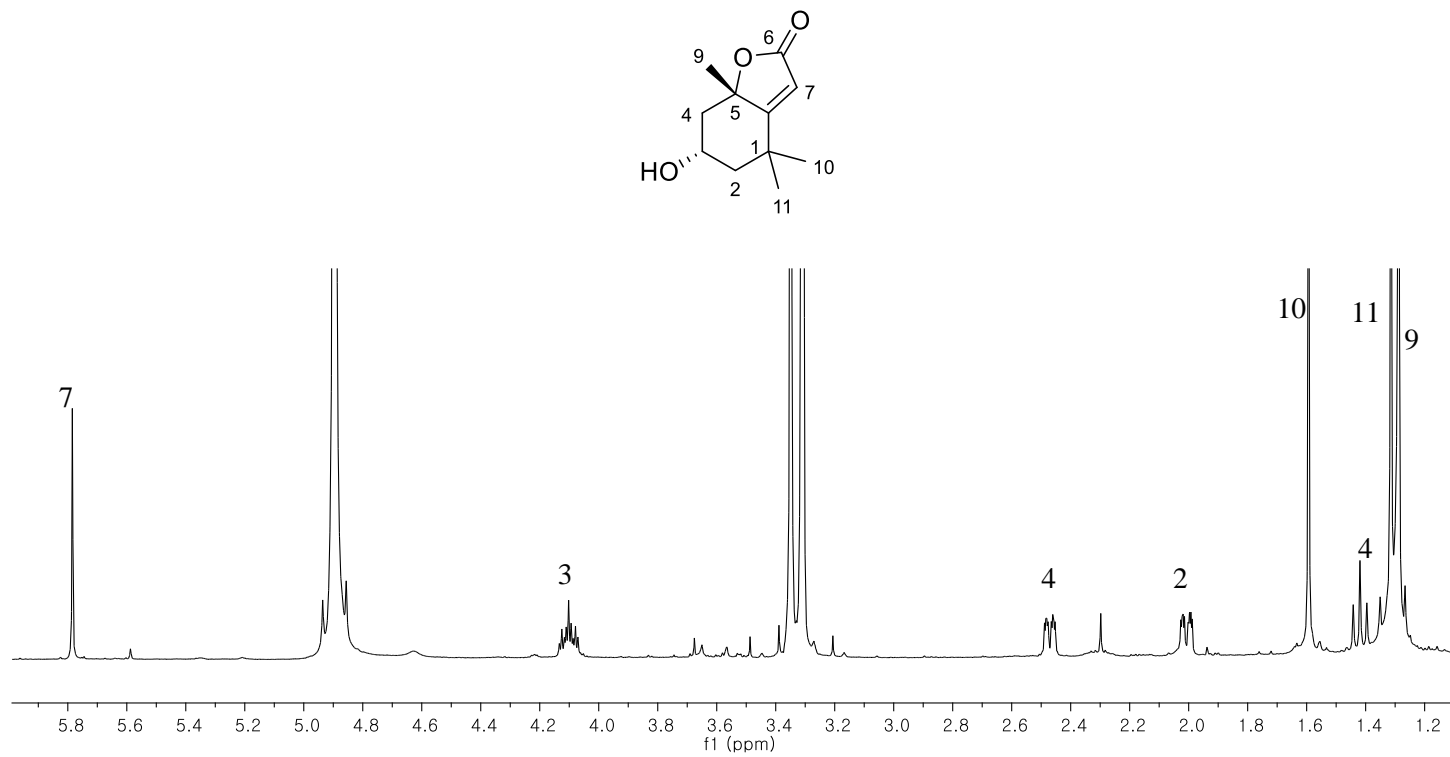


Fig. 115. ^1H -NMR spectrum of compound **40**

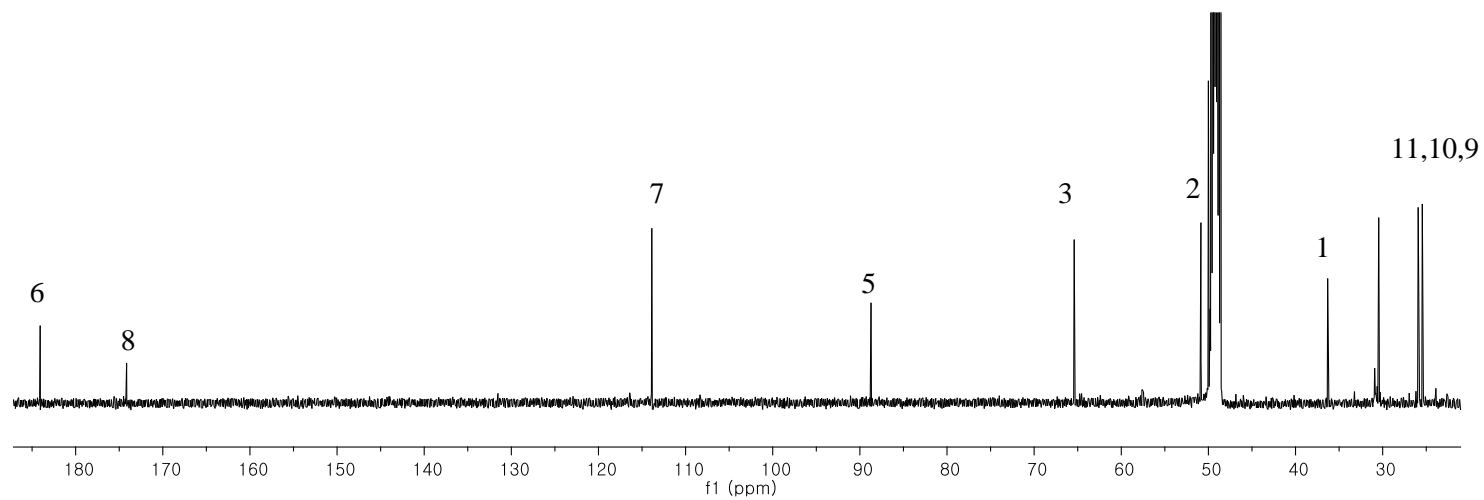
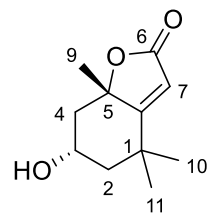


Fig. 116. ^{13}C -NMR spectrum of compound **40**

1.27 화합물 43의 구조

갈색분말 성상의 화합물 43은 MS 값 [m/z 268.1052 $[M+H]^+$ (calcd. for $C_{10}H_{14}N_5O_4$, 268.1046)]에 의해 분자식 $C_{15}H_{16}O_9$ 을 동정하였다. 1H , ^{13}C NMR spectra에서 아홉 개의 aromatic 피크 [δ_C/δ_H 163.7, 150.5, 149.7, 145.7/7.83 (1H, d, $J = 9.5$ Hz), 145.6, 115.4, 114.8/6.29 (1H, d, $J = 9.5$ Hz), 114.0/7.04 (1H, s), 105.4/7.20 (1H, s)]와 하나의 당 moiety [δ_C/δ_H 103.1/4.99 (1H, d, $J = 7.3$ Hz), 78.6, 77.5, 74.8, 71.3, 62.4]을 확인하였다. 1H NMR spectrum에서 coumarin의 특징적인 패턴을 확인하여, 이 화합물이 coumarin 구조에 glucose 하나가 결합되어 있는 구조임을 추정할 수 있다. 이상의 데이터와 문헌과의 비교로 화합물 43을 aesculetin-7-*O*- β -D-glucopyranoside (cichoriin)로 동정하였다 (Kuwajima et al., 1992).

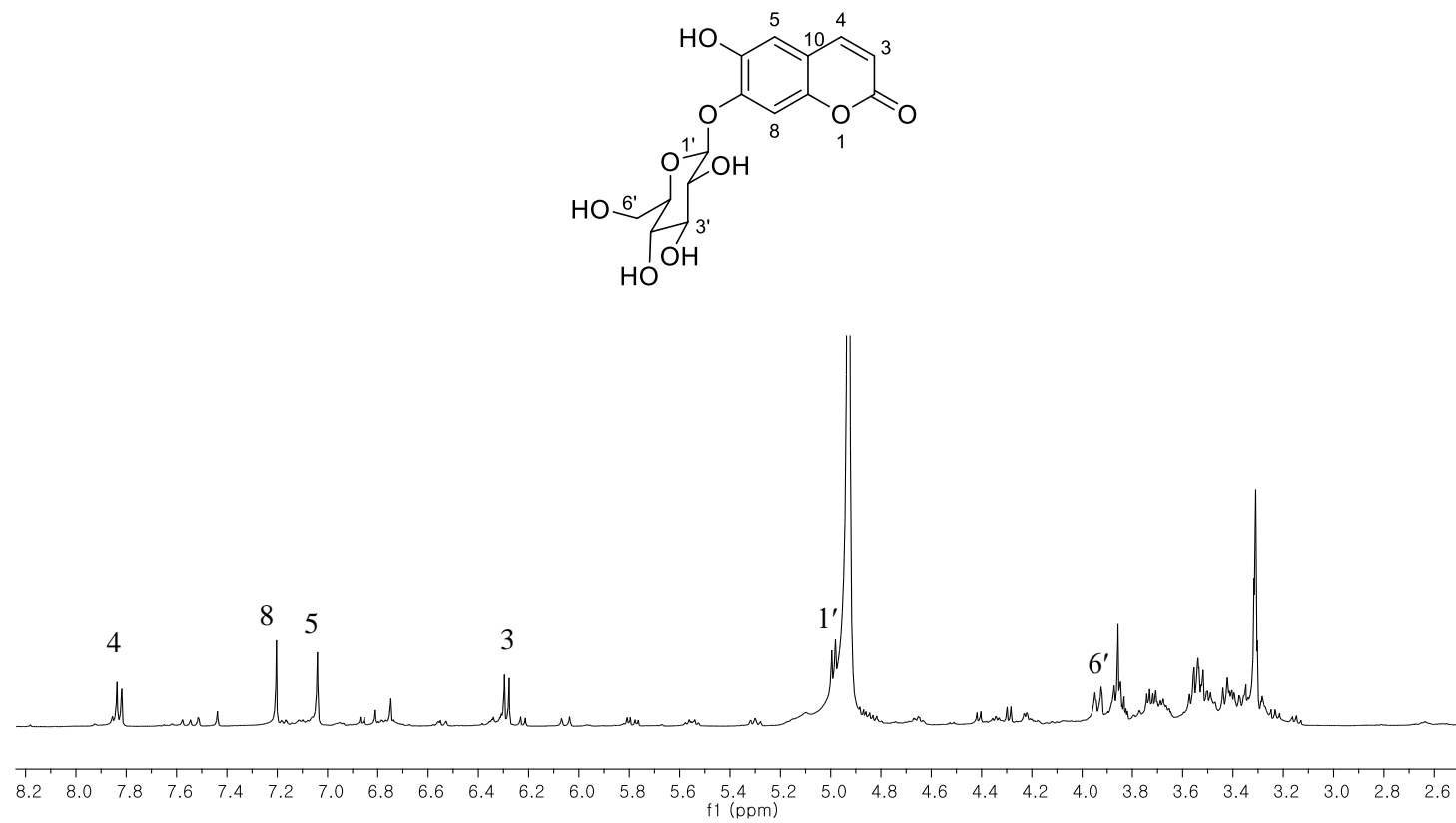


Fig. 117. ^1H -NMR spectrum of compound **43**

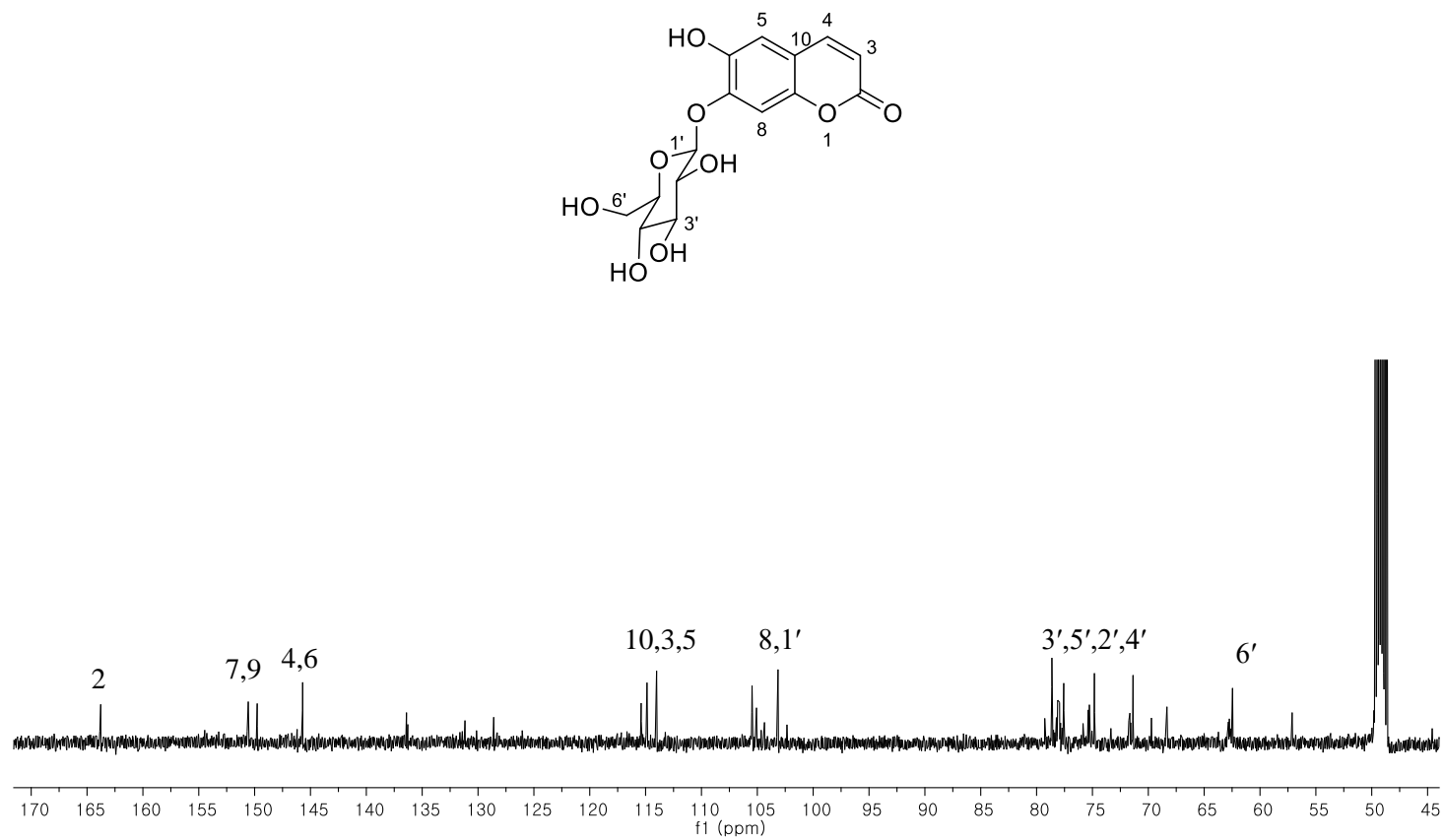


Fig. 118. ^{13}C -NMR spectrum of compound **43**

1.28 화합물 **44**, **45**의 구조

화합물 **44**와 **45**의 성상은 갈색무정형 분말이다. 각각의 HRESIMS 값 [**44**: m/z 395.1330 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{17}H_{24}O_9Na$, 395.1318), **45**: m/z 397.1492 $[M+Na]^+$ (calcd. for $C_{17}H_{26}O_9Na$, 397.1475)] 에 의해 분자식 $C_{17}H_{24}O_9$ 과 $C_{17}H_{26}O_9$ 를 동정하였다. **44**의 1H NMR spectrum에서 1,3,4,5-치환체 [δ_H 6.75 (2H, s)], 한 쌍의 aromatic proton [δ_H 6.55 (1H, d, $J = 15.9$ Hz), 6.33 (1H, dt, $J = 15.9, 5.6$ Hz)], oxygenated proton 하나 [δ_H 4.23 (2H, dd, $J = 5.6, 1.5$ Hz)] 그리고 methoxyl기 두 개 [δ_H 3.86 (6H, s)]를 확인하였다. ^{13}C NMR spectrum에서 여섯 개의 aromatic carbon (δ_C 154.4, 135.9, 135.3, 131.4, 130.1, 105.5), oxygenated carbon (δ_C 63.7) 그리고 methoxyl기 하나 (δ_C 57.1)를 확인 할 수 있었다. 그 외 하나의 당 moiety [δ_C/δ_H 105.4/4.88 (1H, d, $J = 7.6$ Hz), 78.5, 77.9, 75.8, 71.4, 62.6]를 확인할 수 있었고, 문헌치와 비교를 통해 화합물 **44**를 syringin으로 동정하였다 (Luyen et al., 2015).

화합물 **45**의 구조는 **44**과 거의 유사하며, 1H NMR spectrum에서 1, 3, 4, 5-치환체 [δ_H 6.55 (2H, s)], oxygenated proton 하나 [δ_H 3.57 (2H, t, $J = 6.4$ Hz)], 두 개의 aliphatic proton [δ_H 2.64 (2H, m), 1.83 (2H, m)] 그리고 methoxyl기 두 개 [δ_H 3.83 (6H, s)]를 확인하였다. 체인 부분이 aliphatic chain으로 바뀌었으며, 문헌과의 비교로 화합물 **45**의 구조를 dihydrosyringin으로 동정하였다 (Luyen et al., 2015).

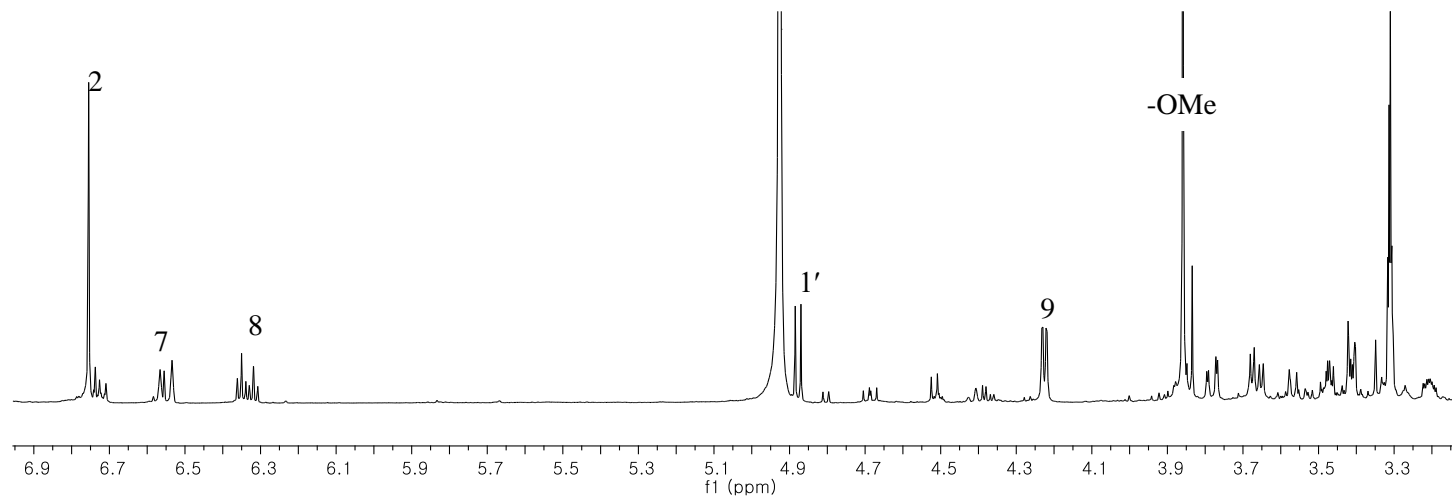
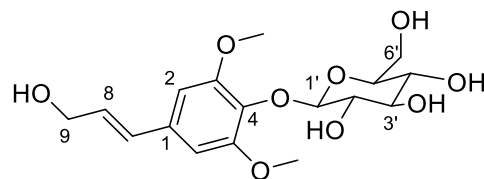


Fig. 119. ^1H -NMR spectrum of compound **44**

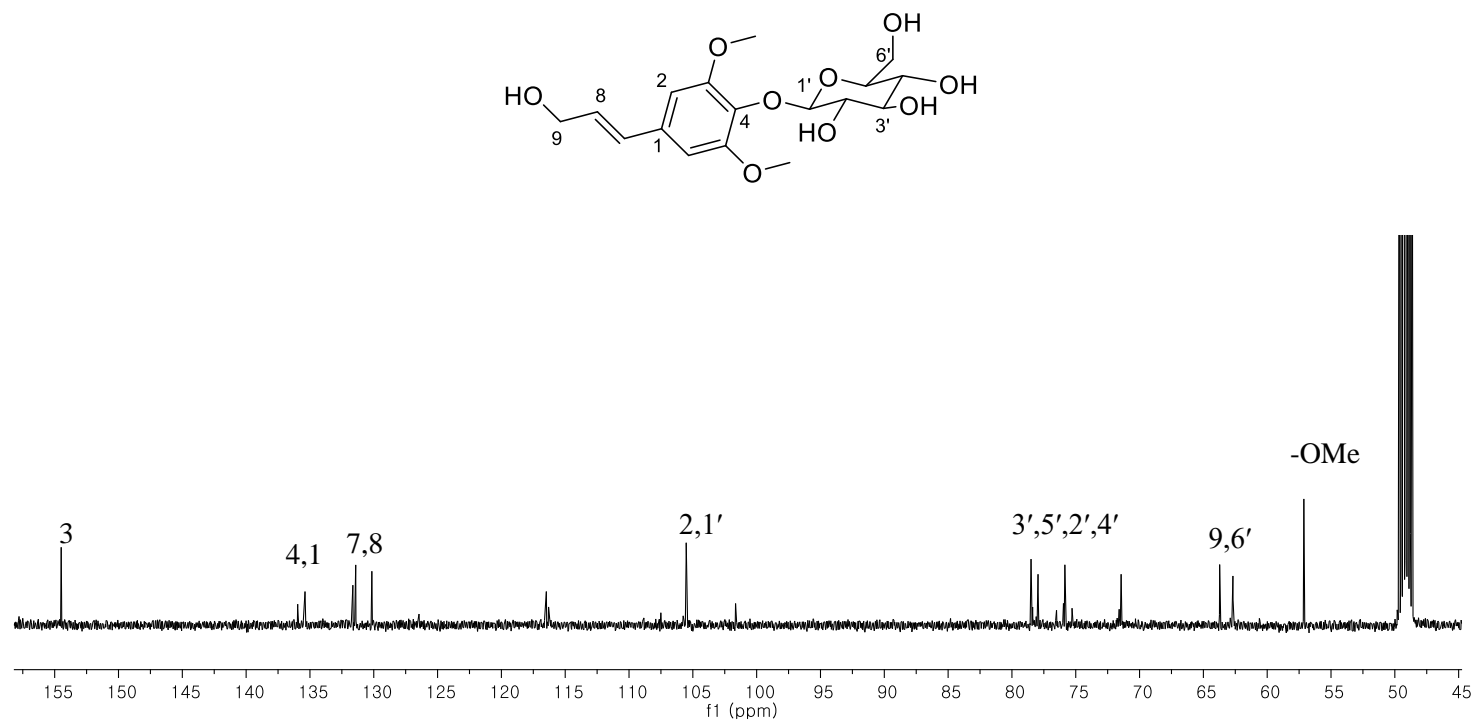


Fig. 120. ^{13}C -NMR spectrum of compound 44

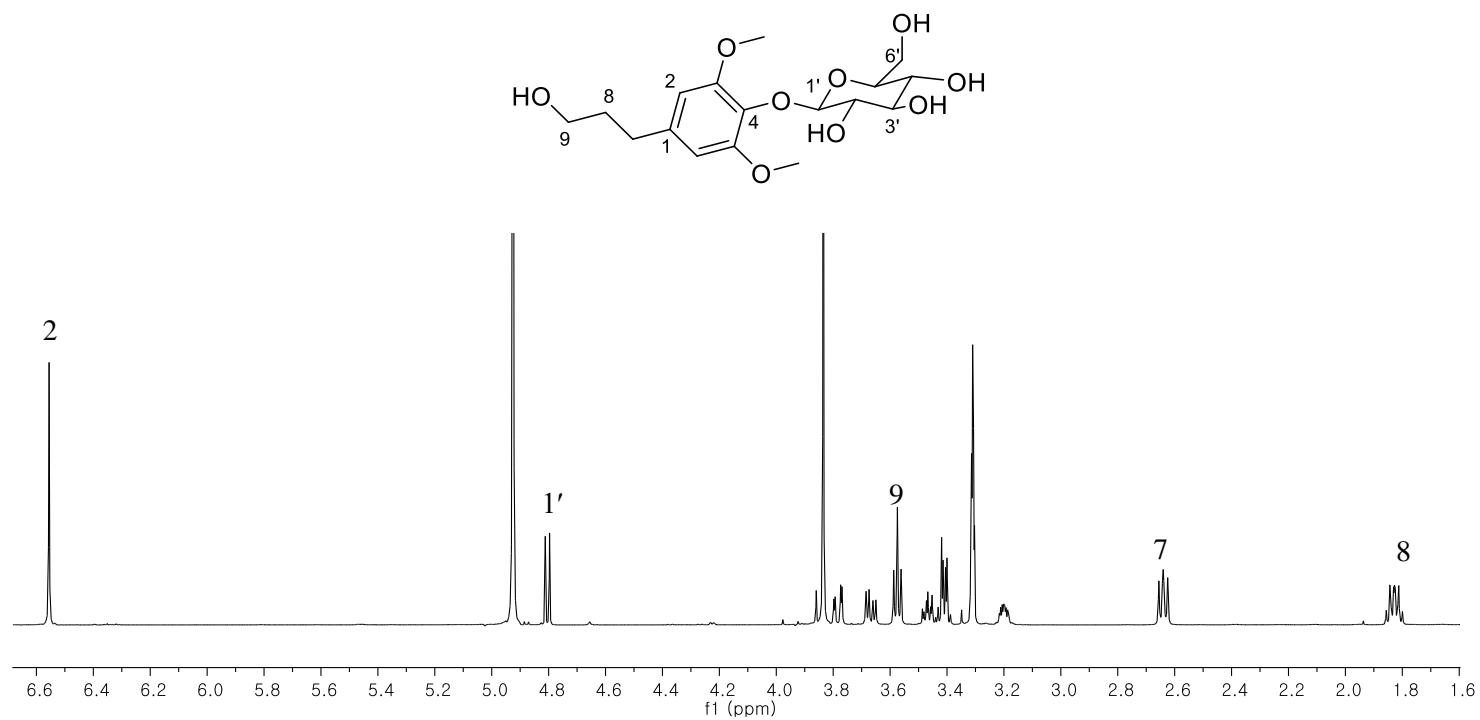


Fig. 121. ^1H -NMR spectrum of compound **45**

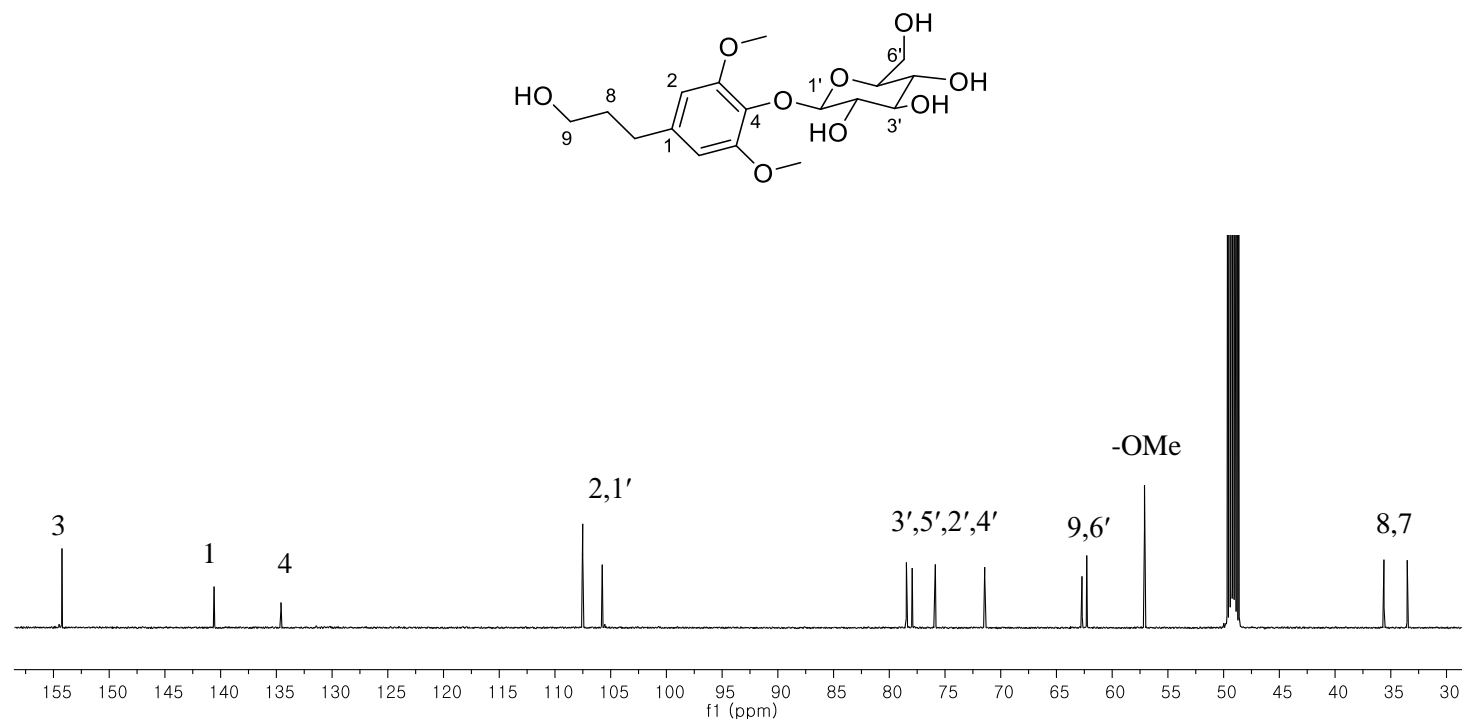


Fig. 122. ^{13}C -NMR spectrum of compound **45**

1.29 화합물 **38**, **41**, **42**, **46**, **47**, **49**의 구조

화합물 **38** 의 분자식은 MS 값 [m/z 198.0522 [$M+Na$]⁺ (calcd. for $C_{10}H_9NO_2Na$, 198.0531)]에 의해 $C_{10}H_9NO_2$ 로 동정하였다. 1H NMR spectrum 에서 indole alkaloid 의 특징을 보이며, 여섯 개의 aromatic proton [δ_H 8.35 (1H, s), 8.17 (1H, d, $J = 7.3$ Hz), 7.48 (1H, d, $J = 7.3$ Hz), 7.48 (1H, d, $J = 7.3$ Hz), 7.22 (1H, m), 7.19 (1H, m)]과 oxygenated proton 하나 [δ_H 4.94 (1H, s)]를 확인할 수 있다. ^{13}C NMR spectrum 에서 ketone 기 하나 (δ_C 194.3), 여덟 개의 aromatic carbon (δ_C 136.2, 133.3, 125.4, 122.7, 121.7, 121.1, 113.1, 112.1) 그리고 methoxyl 기 (δ_C 65.2)를 확인하였고 문헌과의 비교를 통해 화합물 **38** 을 glycerindole 로 동정하였다 (Wang et al., 2014).

갈색무정형 분말 화합물 **41** 은 분자식 $C_6H_6N_2O$ 을 갖는다 [m/z 123.0557 [$M+H$]⁺ (calcd. for $C_6H_7N_2O$, 123.0558)]. 1D NMR spectra 에서 하나의 carbonyl 기 (δ_C 169.9), 다섯 개의 aromatic signal [δ_C/δ_H 152.9/8.69 (1H, d, $J = 4.0$ Hz), 149.6/ 9.03 (1H, s), 137.5/8.29 (1H, m), 131.5, 125.3/7.55 (1H, ddd, $J = 8.0, 4.9, 0.5$ Hz)]을 보인다. 문헌과의 비교를 통해 nicotinamide 구조를 동정하였다 (Yamashita et al., 1989).

갈색무정형 분말 화합물 **42**의 분자식 $C_{10}H_{13}N_5O_4$ 이다 [m/z 268.1052 [$M+H$]⁺ (calcd. for $C_{10}H_{14}N_5O_4$, 268.1046)]. 1H , ^{13}C , HSQC NMR spectra를 통해 다섯 개의 aromatic signal [δ_C/δ_H 157.7, 153.6/ 8.18 (1H, s), 150.1, 142.1/ 8.32 (1H, s), 121.1], 하나의 pentose moiety [δ_C/δ_H 91.4/ 5.96 (1H, d, $J = 6.5$ Hz), 88.3/4.17 (1H, dd, $J = 5.0, 2.5$ Hz), 75.6/ 4.74 (1H, dd, $J = 6.4, 5.2$ Hz), 72.8/ 4.32

(1H, dd, $J = 5.0, 2.5$ Hz), 63.6/3.89 (1H, dd, $J = 12.5, 2.4$ Hz), 3.75 (1H, dd, $J = 12.6, 2.6$ Hz)]를 확인할 수 있다. 문헌치와의 비교를 통해 **42**를 adenosine으로 동정하였다 (Sun et al., 2015).

화합물 **46**은 황색무정형 분말로 분자식 $C_{12}H_{12}N_2O_2$ 을 갖는다 [m/z 217.0975 $[M+H]^+$ (calcd. for $C_{12}H_{13}N_2O_2$, 217.0977)]. 1H NMR spectrum에서 전형적 indole alkaloid signal인 [δ_H 7.44 (1H, d, $J = 7.8$ Hz), 7.32 (1H, d, $J = 7.8$ Hz), 7.06 (1H, t, $J = 7.8$ Hz), 6.98 (1H, t, $J = 7.8$ Hz)]와 두 개의 methylene [δ_H 4.17 (2H, d, $J = 15.4$ Hz), 3.11 (1H, dd, $J = 15.9, 4.5$ Hz), 2.78 (1H, dd, $J = 15.5, 10.5$ Hz)] 그리고 하나의 methine [δ_H 3.55 (1H, dd, $J = 10.9, 4.4$ Hz)]을 확인하였다. ^{13}C NMR spectra에서 indole alkaloid (δ_C 128.1, 106.8, 117.7, 118.7, 121.2, 111.1, 136.2, 126.7), carboxyl 기 하나 (δ_C 169.6), 세 개의 methine carbon (δ_C 56.7, 40.5, 23.1)을 확인하였다. 이상의 결과와 문헌을 비교하여 lycoperodine-1로 동정하였다 (Song et al., 2014).

화합물 **47**은 백색무정형분말로 분자량 m/z 144.0663 $[M+H]^+$ (calcd. for $C_6H_{10}NO_3$, 144.0661)로 분자식 $C_6H_9NO_3$ 을 구하였다. 1H , ^{13}C NMR spectra를 통해 두 개의 carbonyl기 (δ_C 182.2, 174.6), 세 개의 methine signal [δ_C/δ_H 57.1/ 4.30 (1H, dd, $J = 9.0, 4.4$ Hz), 30.4/2.33 (2H, m) and 25.9/2.47 (1H, m), 2.16 (1H, m)]과 methoxyl기 [δ_C/δ_H 53.0/ 3.76 (3H, s)]를 확인할 수 있다. 문헌치와의 비교로 화합물 **47**을 (S)-pyroglutamate로 동정하였다 (Barraclough et al., 2006).

화합물 **49**는 갈색분말 성상으로 분자식 $C_9H_{11}NO_2$ 을 갖는다

[m/z 166.0860 [$M+H$]⁺ (calcd. for C₉H₁₁NO₂, 166.0868)]. ¹H, ¹³C NMR spectra에
서 하나의 phenyl 기 [δ_C/δ_H 137.4, 130.5, 130.1, 128.5/7.28 – 7.39 (5H, m)],
carboxyl 기(δ_C 179.5), amino signal [δ_C/δ_H 57.7/4.61 (1H, s)] 그리고 methylene
signal [δ_C/δ_H 38.4/3.78 (1H, dd, J = 9.0, 4.3 Hz), 3.00 (1H, dd, J = 14.5, 9.0 Hz)]을
발견할 수 있다. 문헌치와의 비교에 의하여 구조를 phenylalanine로
동정하였다 (Xiong et al., 2002).

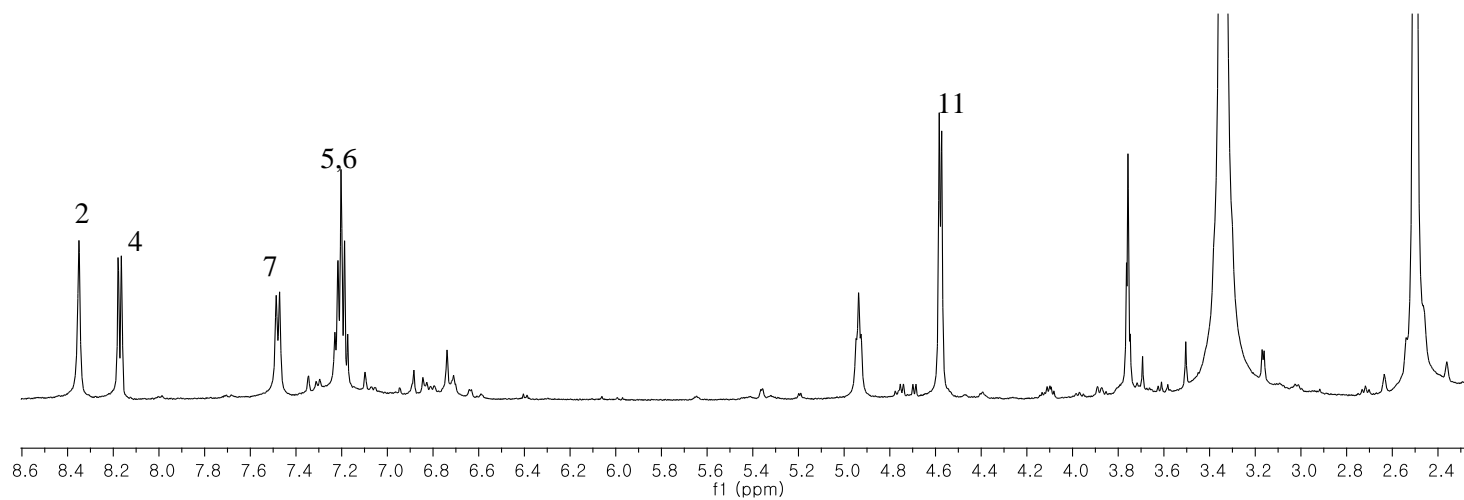
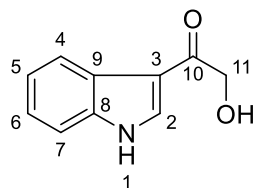


Fig. 123. ^1H -NMR spectrum of compound **38**

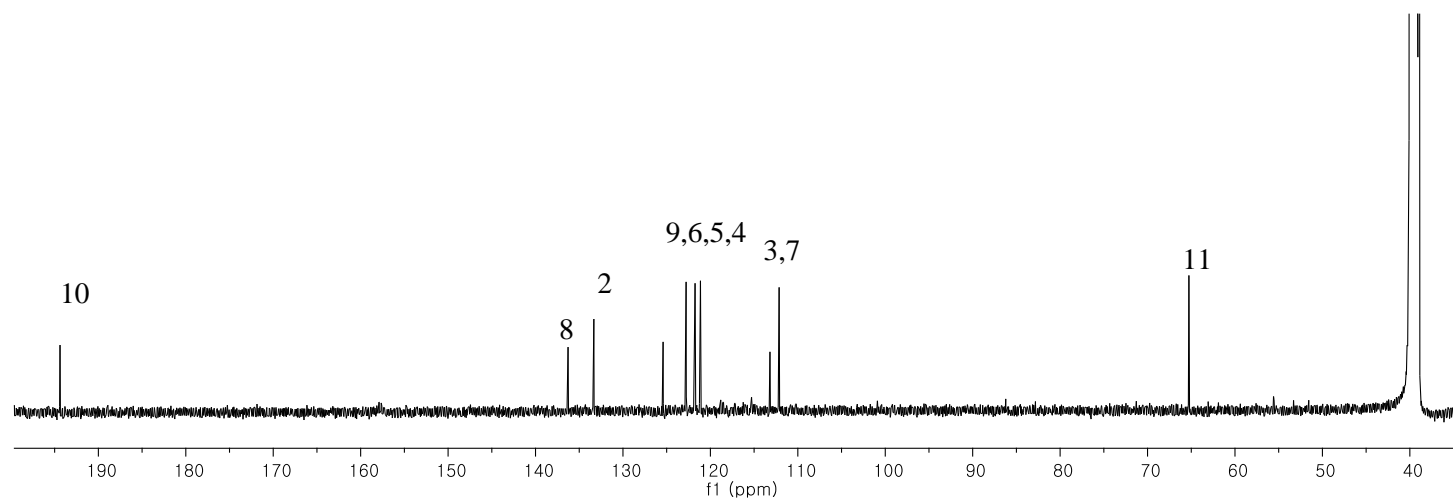
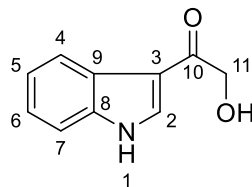


Fig. 124. ^{13}C -NMR spectrum of compound **38**

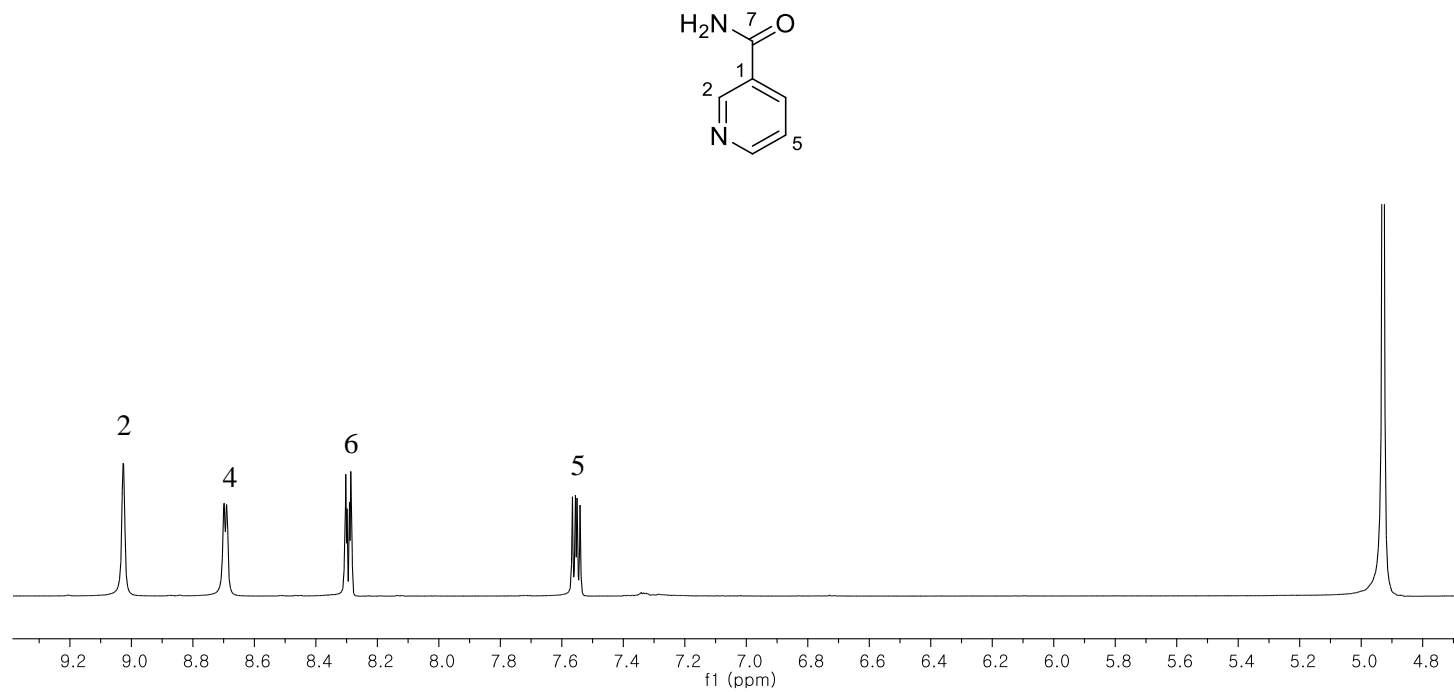


Fig. 125. ^1H -NMR spectrum of compound **41**

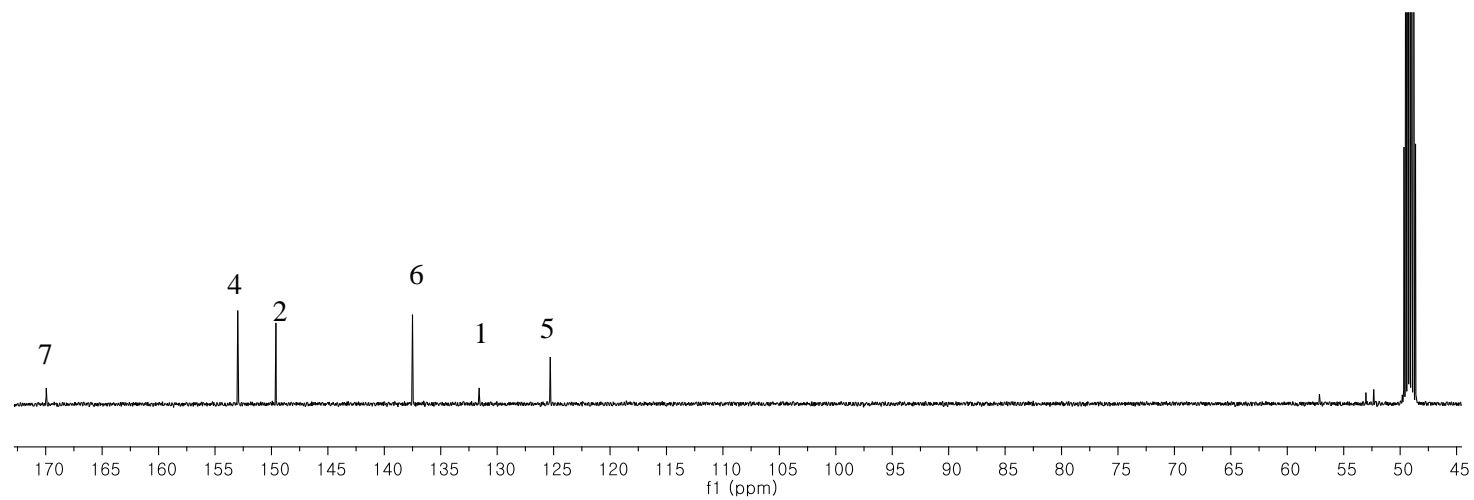
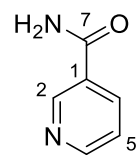


Fig. 126. ^{13}C -NMR spectrum of compound **41**

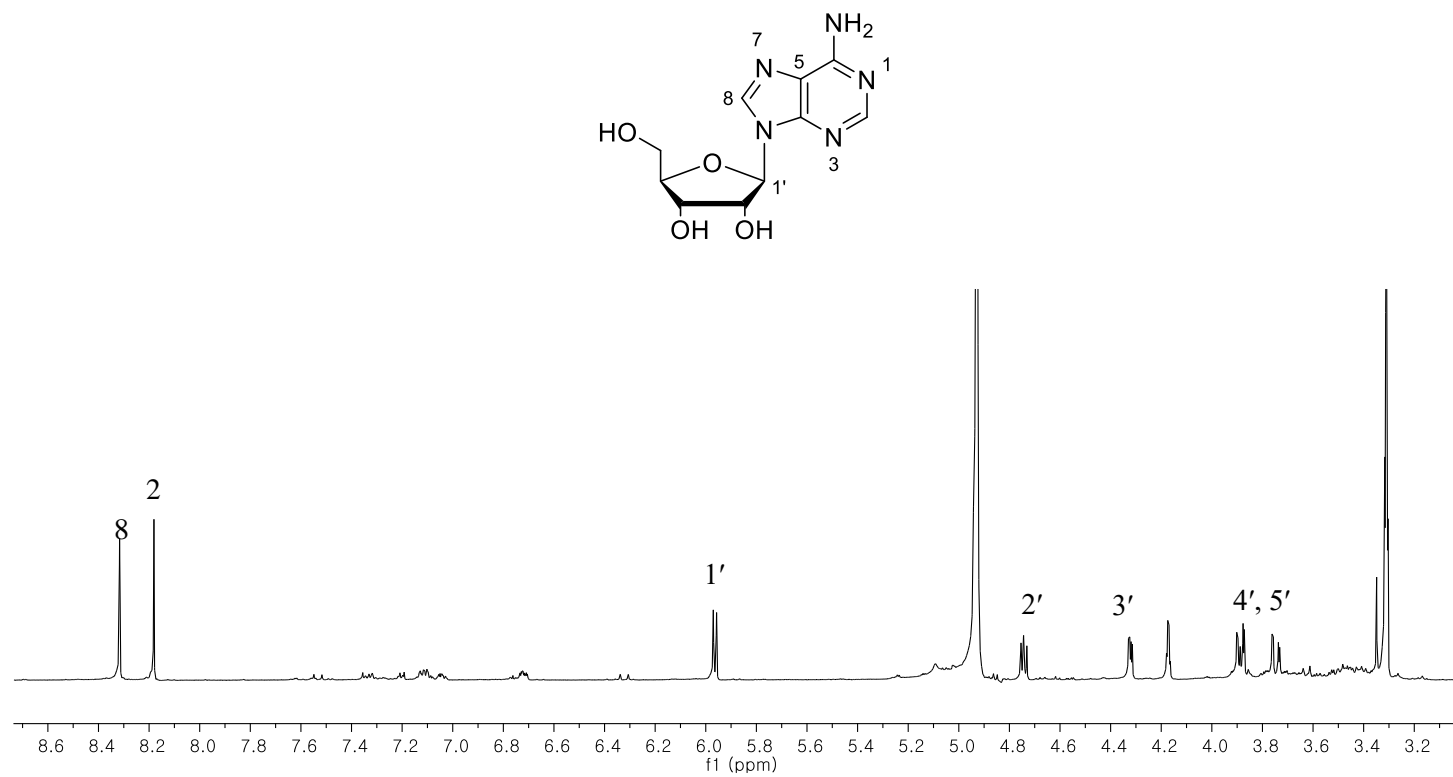


Fig. 127. ¹H-NMR spectrum of compound **42**

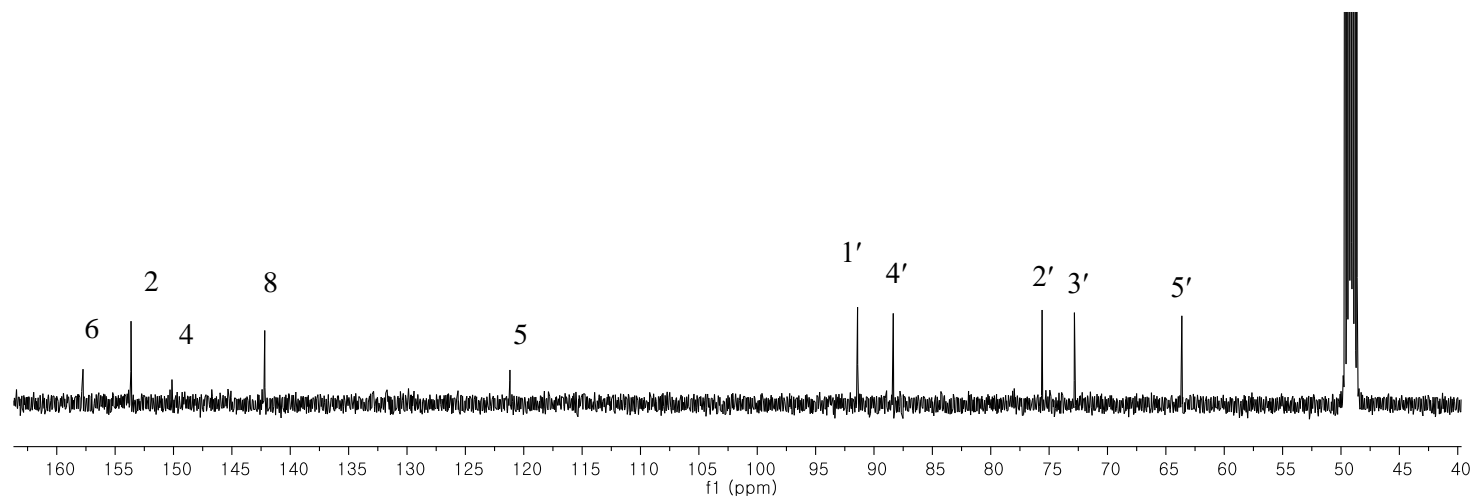
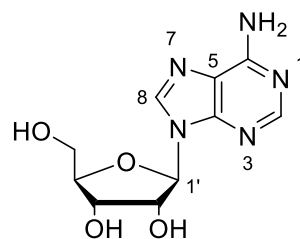


Fig. 128. ^{13}C -NMR spectrum of compound **42**

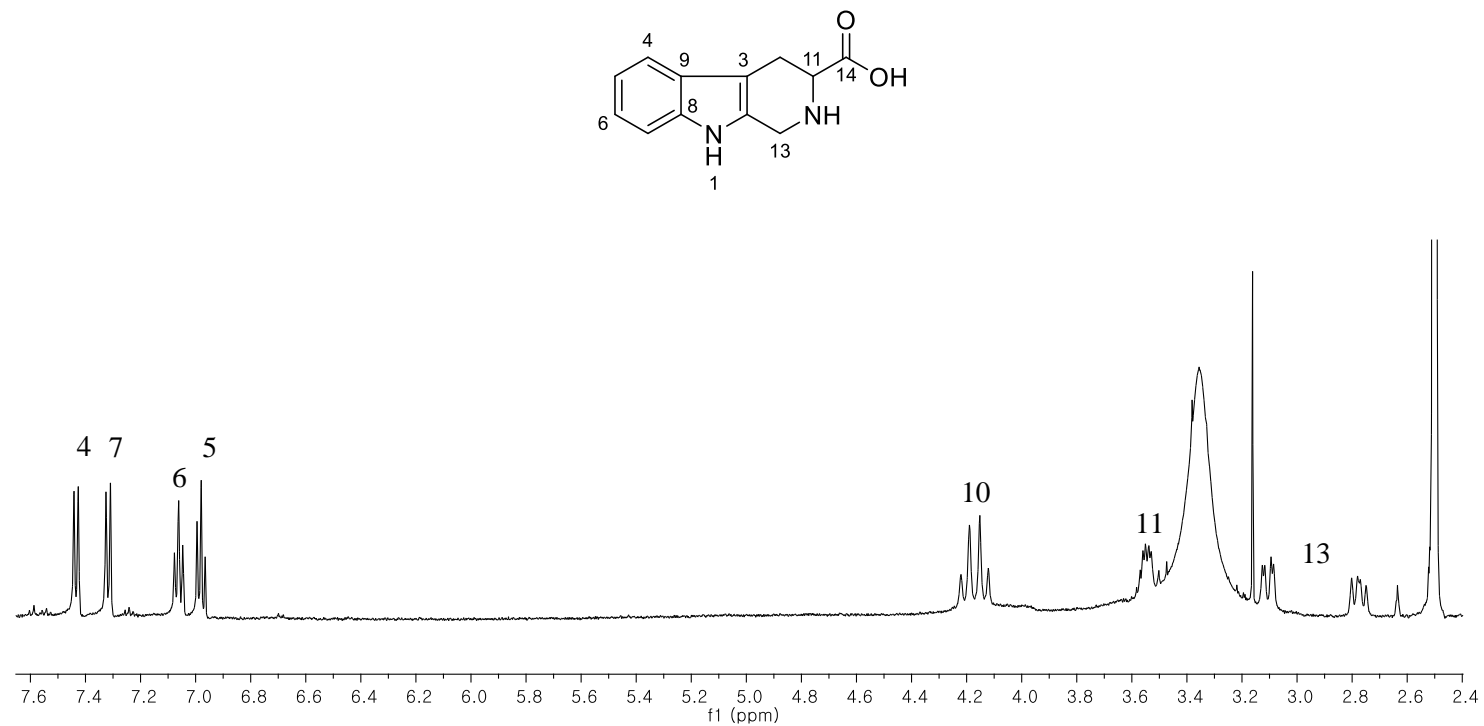


Fig. 129. ^1H -NMR spectrum of compound **46**

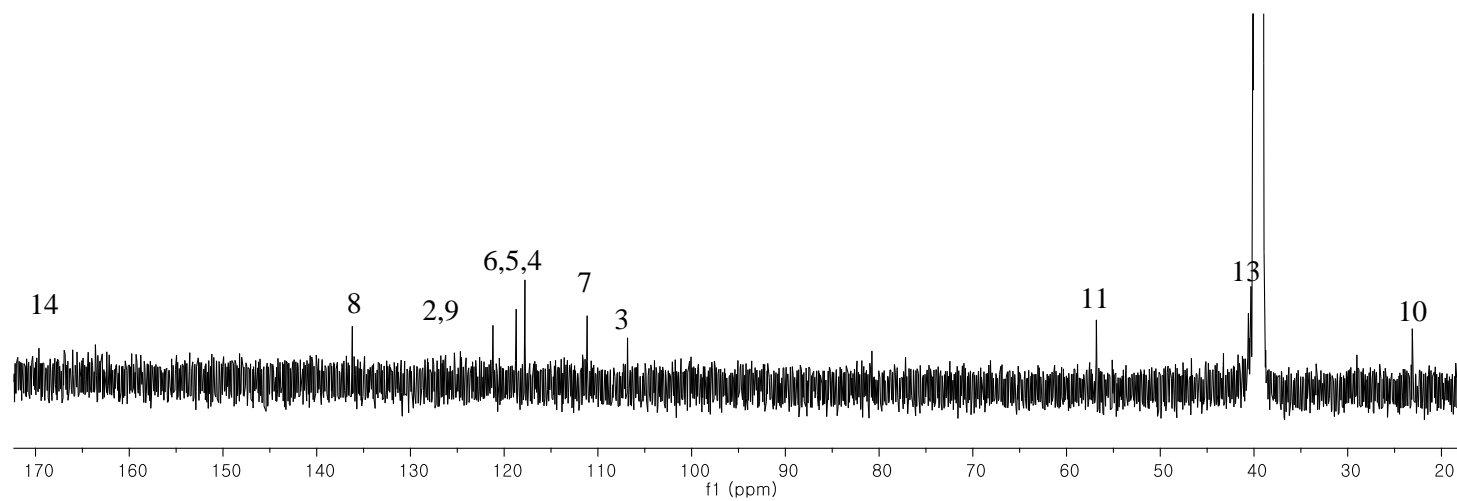
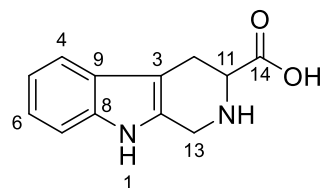


Fig. 130. ^{13}C -NMR spectrum of compound **46**

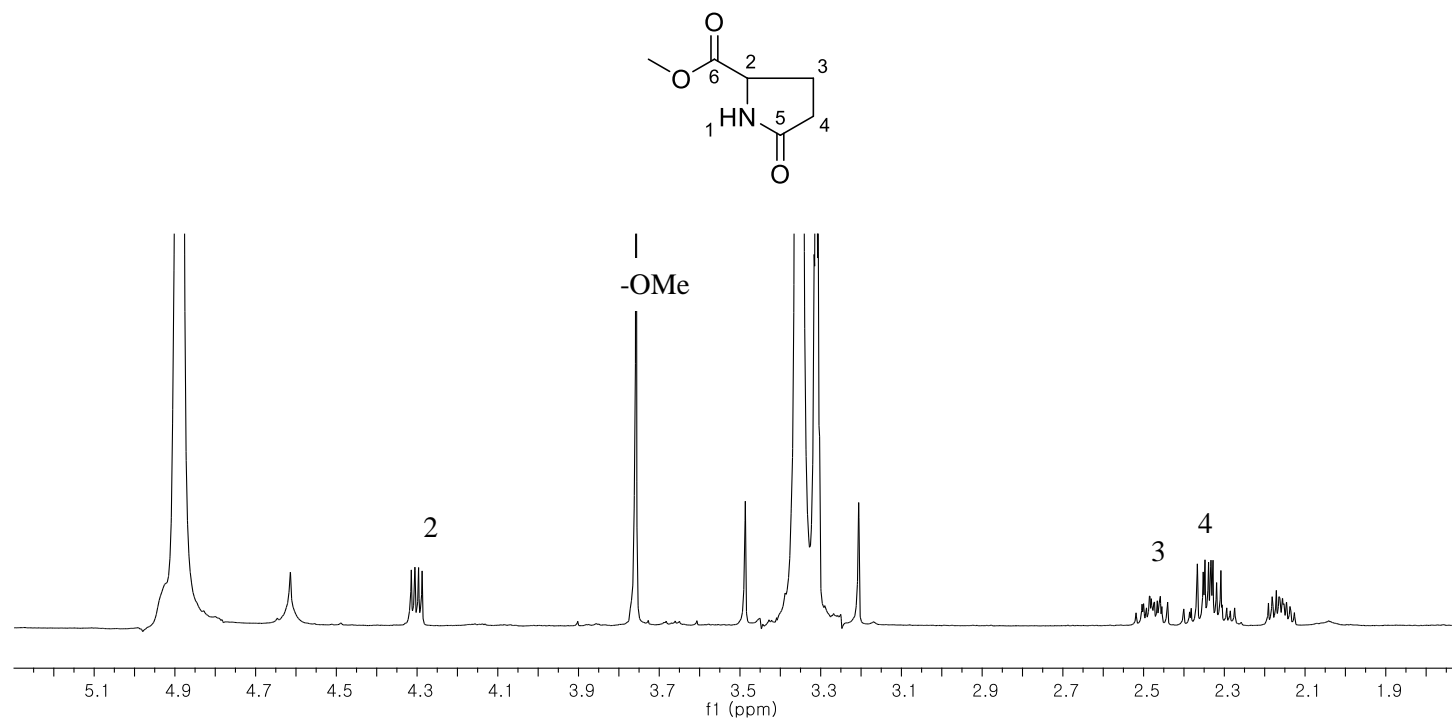


Fig. 131. ^1H -NMR spectrum of compound **47**

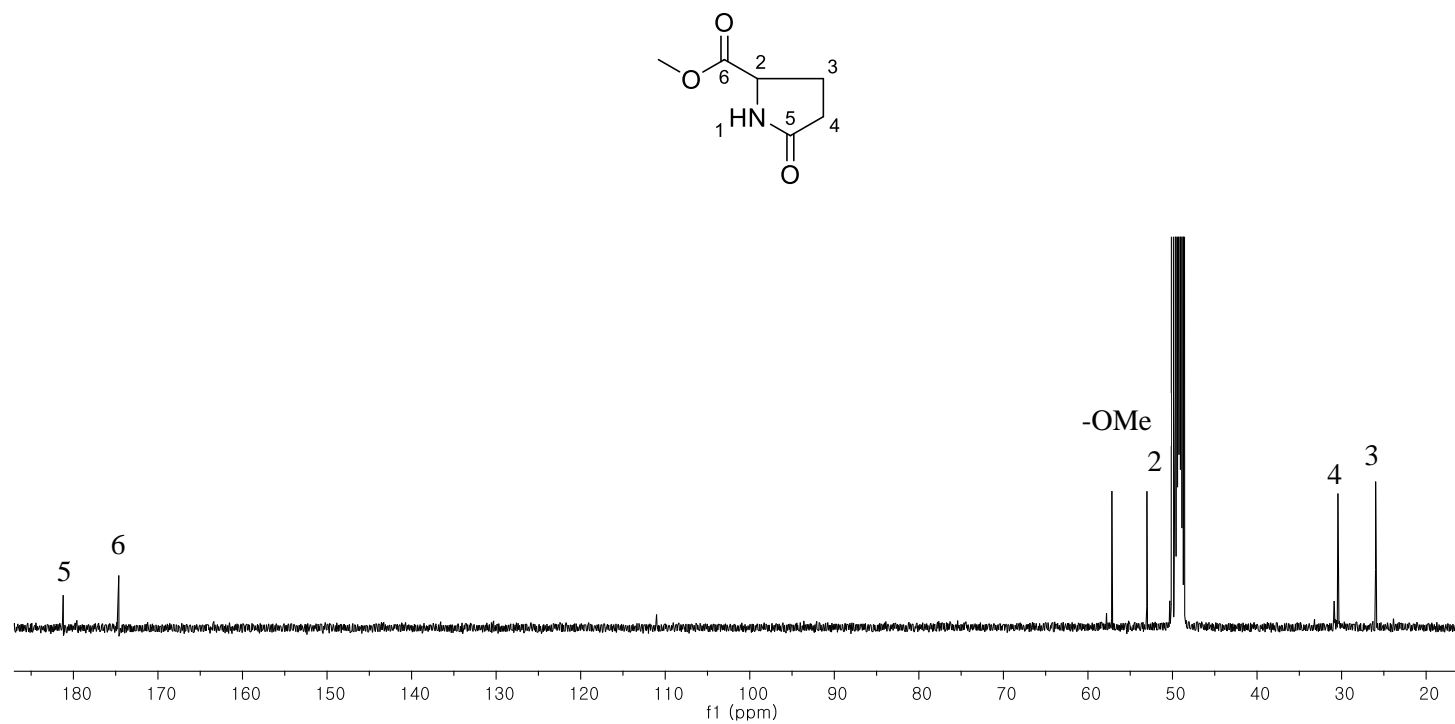


Fig. 132. ^{13}C -NMR spectrum of compound **47**

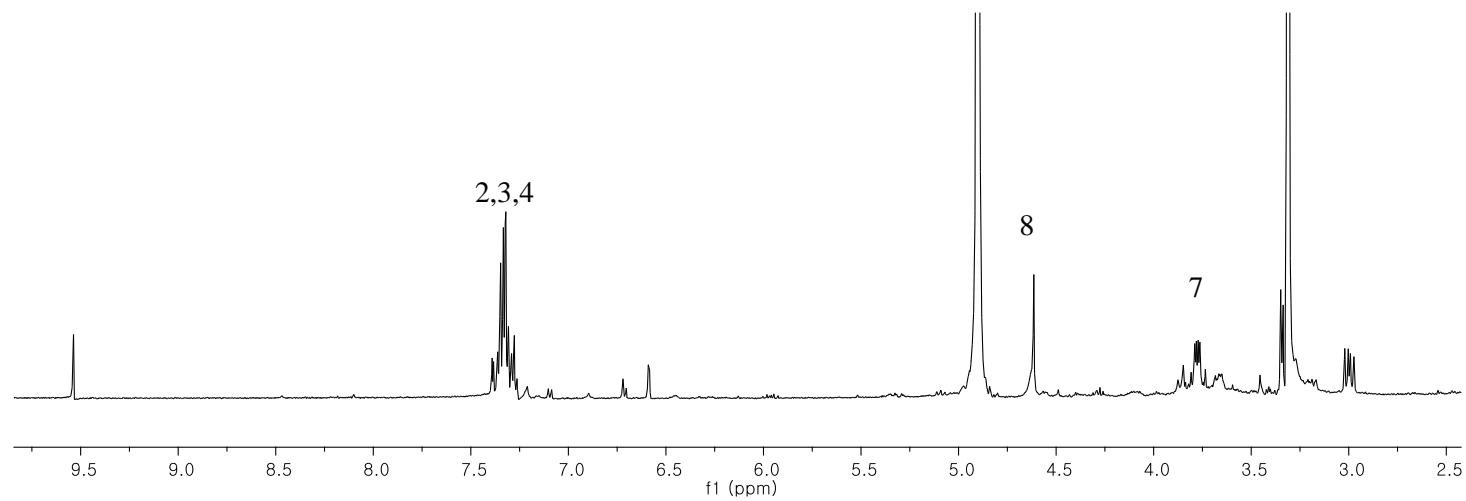
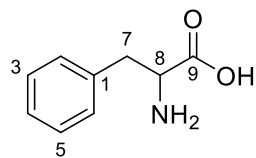


Fig. 133. ^1H -NMR spectrum of compound **49**

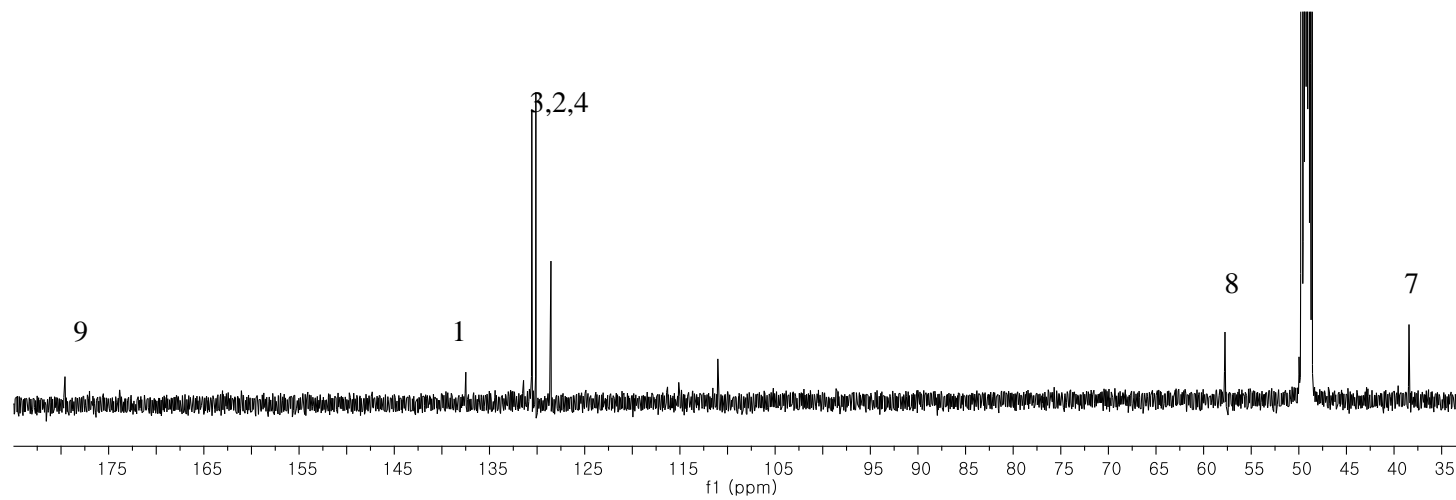
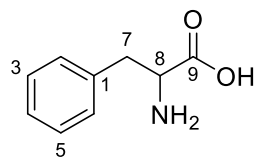


Fig. 134. ^{13}C -NMR spectrum of compound **49**

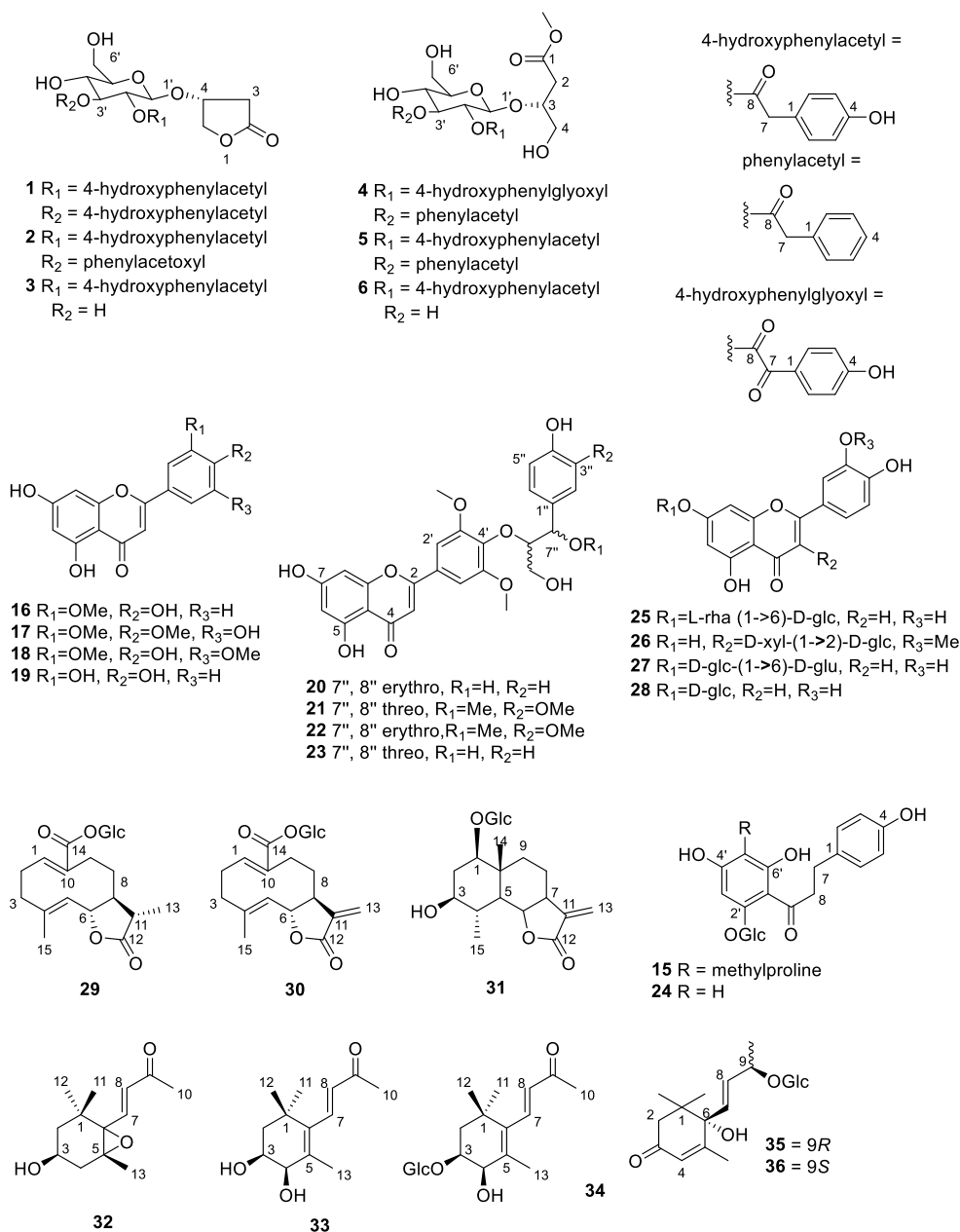


Fig. 135. Isolated compounds from *T. officinale* (continued)

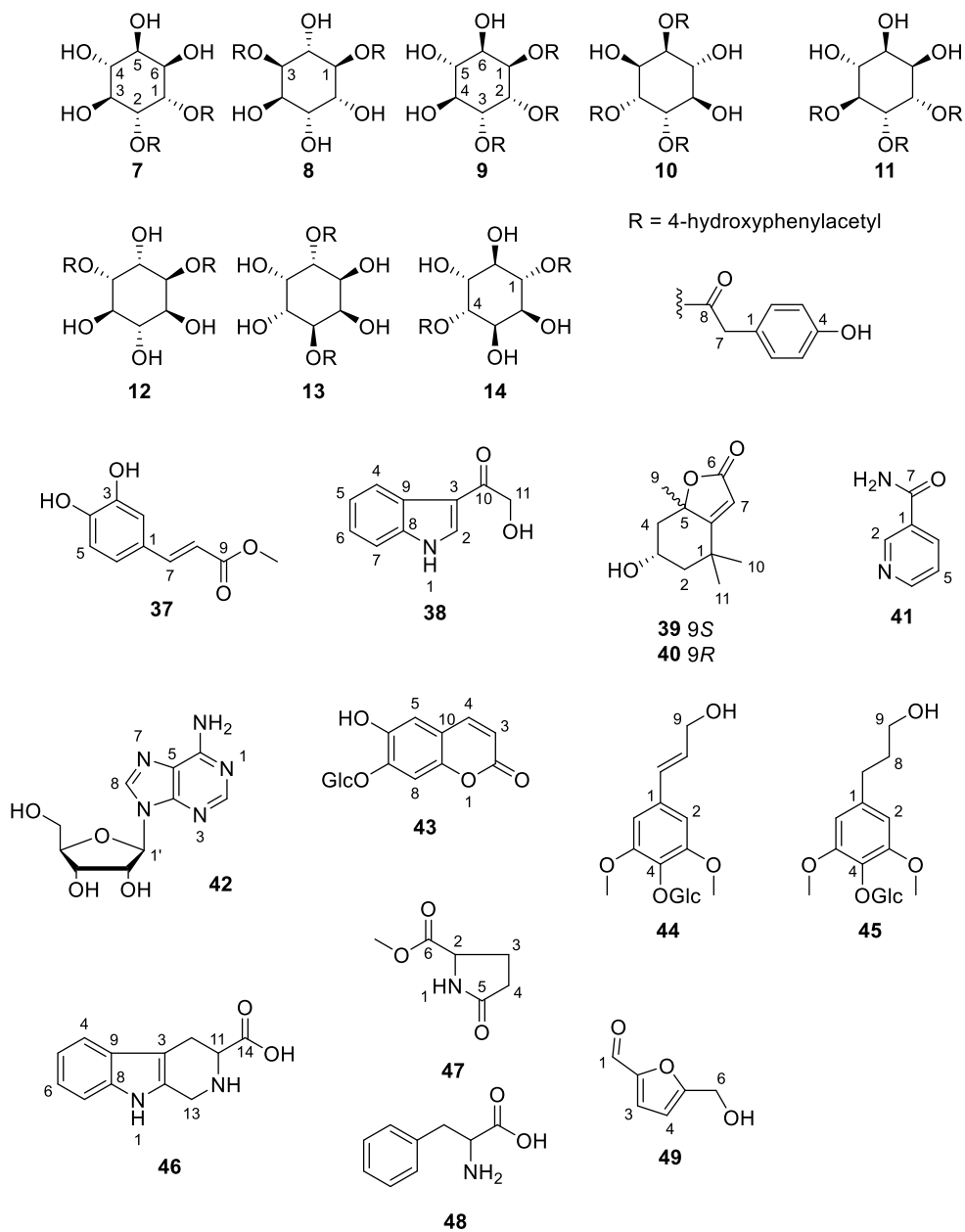


Fig. 136. Isolated compounds from *T. officinale*

2. 알파글루코시데이즈 억제활성

2.1 알파글루코시데이즈 억제활성

모든 화합물에 대하여 알파글루코시데이즈 억제 활성을 확인하였다. 그 결과 신규화합물 butyrolactone (**1** - **3**)과 butanoate (**4** - **6**) 화합물의 억제 활성 (IC_{50} 145.3 - 181.3 μ M)이 positive control인 acarbose (IC_{50} 179.9 μ M)와 유사하게 나타났다. 그리고 inositol 화합물 (**7** - **12**)의 억제활성은 acarbose 보다 우수하게 나타났는데 (IC_{50} 51.8 - 153.2 μ M), 특히 화합물 **9** - **11** 의 억제활성이 매우 우수하게 나타났다 (IC_{50} 51.8 - 61.2 μ M). Inositol 화합물의 구조를 살펴보면 두 개의 functional group을 가질 때 (**7**, **8**, **12**)는 acarbose와 유사한 정도의 활성을 보이지만, 세 개의 functional group을 가질 때 (**9** - **11**) 억제활성이 월등히 높아지는 것을 확인할 수 있다. 다만 화합물 **13**, **14**와 같이 functional group의 결합위치가 떨어져 있는 경우 거의 활성이 보이지 않았다. 화합물 **1** - **6** 의 활성도 같은 이유로 두 개의 functional group이 인접해 있을 때, 우수한 억제활성이 나타나는 것으로 보인다. 위와 같은 결과로, 화합물에 4-hydroxyphenylacetyl기와 같은 functional group과 이들의 위치가 알파글루코시데이즈 억제 활성에 영향을 미치는 것을 추측할 수 있다.

Table 21. α -Glucosidase inhibition activities of compound **1** – **49**.

Sample	Inhibition rate (%) ^a	IC50 (μ M)	Sample	Inhibition rate (%) ^a	IC50 (μ M)	Sample	Inhibition rate (%) ^a	IC50 (μ M)	Sample	Inhibition rate (%) ^a	IC50 (μ M)
1	58.3 \pm 4.6	151.9 \pm 0.6	16	56.9 \pm 2.3	155.9 \pm 3.2	31	5.4 \pm 4.6	ND ^c	46	4.5 \pm 3.1	ND ^c
2	58.9 \pm 2.9	145.3 \pm 3.6	17	57.4 \pm 2.2	154.1 \pm 2.5	32	17.6 \pm 5.0	ND ^c	47	11.1 \pm 3.1	ND ^c
3	57.6 \pm 2.9	181.3 \pm 4.3	18	59.1 \pm 1.2	161.6 \pm 2.2	33	9.1 \pm 1.4	ND ^c	48	2.7 \pm 3.1	ND ^c
4	56.6 \pm 1.6	165.1 \pm 4.5	19	99.6 \pm 6.6	39.8 \pm 4.2	34	0 \pm 1.5	ND ^c	49	4.1 \pm 2.1	ND ^c
5	59.7 \pm 4.0	149.9 \pm 0.6	20	8.7 \pm 2.7	ND ^c	35	13.7 \pm 1.5	ND ^c	Acarbose ^b	51.8 \pm 3.8	179.9 \pm 2.9
6	56.6 \pm 1.6	165.1 \pm 0.6	21	8.3 \pm 2.5	ND ^c	36	9.4 \pm 3.0	ND ^c			
7	63.7 \pm 3.9	115.2 \pm 4.3	22	9.1 \pm 1.4	ND ^c	37	1.6 \pm 1.4	ND ^c			
8	62.0 \pm 0.7	153.2 \pm 2.8	23	13.2 \pm 2.5	ND ^c	38	1.6 \pm 5.5	ND ^c			
9	85.9 \pm 3.7	56.6 \pm 4.3	24	73.9 \pm 1.5	86.7 \pm 3.1	39	8.8 \pm 2.4	ND ^c			
10	77.6 \pm 2.9	61.2 \pm 3.5	25	7.8 \pm 3.0	ND ^c	40	6.4 \pm 4.8	ND ^c			
11	78.7 \pm 1.0	51.8 \pm 6.3	26	10.3 \pm 2.6	ND ^c	41	1.8 \pm 2.7	ND ^c			
12	60.5 \pm 1.9	150.3 \pm 1.6	27	17.7 \pm 4.6	ND ^c	42	3.5 \pm 6.1	ND ^c			
13	9.3 \pm 1.5	ND ^c	28	14.4 \pm 1.5	ND ^c	43	1.8 \pm 2.7	ND ^c			
14	14.4 \pm 1.5	ND ^c	29	13.1 \pm 1.4	ND ^c	44	1.8 \pm 2.7	ND ^c			
15	61.5 \pm 4.6	151.5 \pm 4.1	30	5.1 \pm 1.5	ND ^c	45	3.6 \pm 4.1	ND ^c			

^a inhibition rate measured at 200 μ M. Data expressed as mean \pm SD of triplicate experiments.^b positive control^c not detected

2.2 알파글루코시데이즈 억제유형

억제 활성이 우수한 화합물들의 억제유형을 알아보기 위해 Lineweaver-Burk plot을 사용하였다. 화합물 **1** - **6** 중에 가장 우수한 억제활성을 보인 화합물 **2**와 flavonoid에서 가장 높은 활성을 갖는 화합물 **19**, **24** 그리고 inositol에서 우수한 억제활성을 보인 화합물 **9** - **11**에 대해 서로 다른 기질 농도로 Lineweaver-Burk plot을 그렸다. 그 결과, 화합물 **2**, **19**, **24**는 mixed-type 억제유형을 보였고 화합물 **9** - **11**은 acarbose와 같이 전형적인 경쟁적 저해 유형을 보였다 (Fig 102).

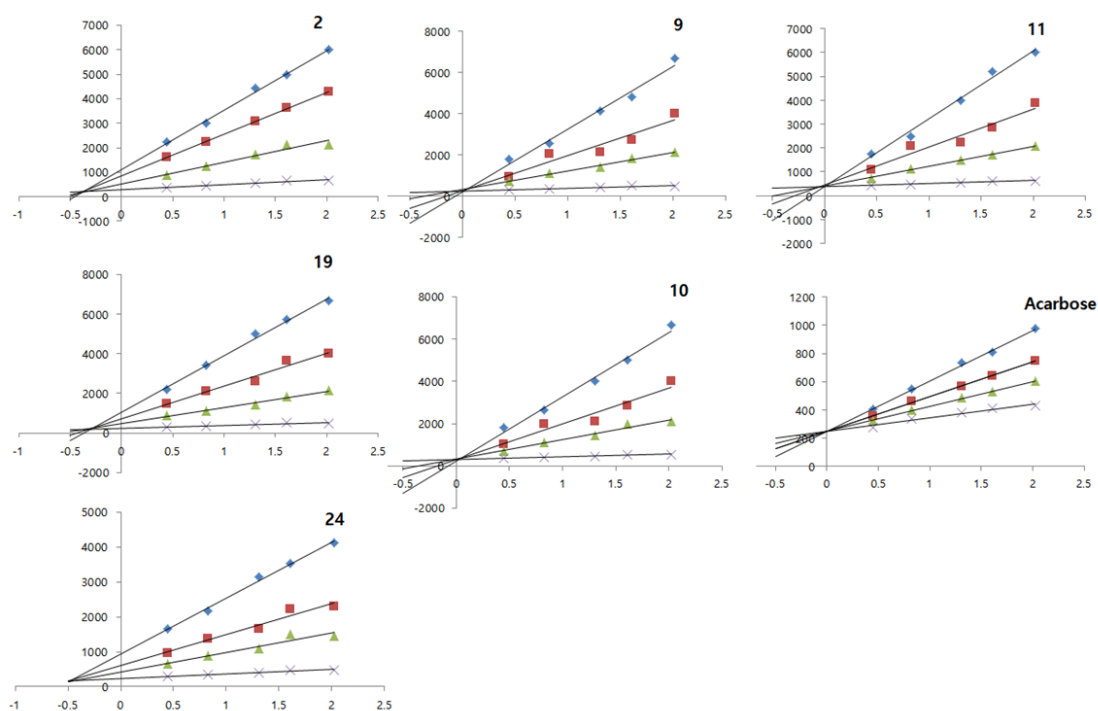


Fig.137. Lineweaver-Burk plots for the inhibition of α -glucosidase in the compound **2**, **9**, **10**, **11**, **19**, **24** and acarbose.

IV. 결론

1. 본 연구는 포공영 (*T. officinale*)에 대해 식물화학적 연구를 실시하였고 그 결과 49개의 화합물을 분리하였다.
2. 49개의 화합물은 세 개의 butyrolactone, 세 개의 butanoate, 여덟 개의 inositol, 열 네 개의 flavonoid, 세 개의 sesquiterpene, 다섯 개의 megasitgmane 그리고 열 세 개의 기타화합물들로 구성되어 있다.
3. 이 중 10개의 화합물 taraxiroside A-F (1-6), 1D-1,2-di-*O*-4-hydroxyphenylacetyl-*chiro*-inositol (7), 1D-1,3-di-*O*-4-hydroxyphenylacetyl-*chiro*-inositol (8), 1D-1,2,3-tri-*O*-4-hydroxyphenylacetyl-*chiro*-inositol (9), 5'-methylproline phloridzin (15)는 천연에서 처음 분리보고 되는 화합물이다.
4. 모든 화합물에 대하여 알파글루코시다이즈 억제활성을 확인하였고, 그 결과 화합물 9-11, 19, 24에서 우수한 억제활성을 보였다. 또한 신규화합물인 butyrolactone, butanoate 화합물들은 positive control인 acarbose와 유사한 활성을 보였다.
5. 억제반응 유형을 알아보기 위해 Lineweaver-Burk plot을 사용하였고 그 결과, butyrolactone 과 flavonoid 는 mixed-type 억제유형을 보였고 세 개의 functional group을 갖는 inositol은 경쟁적 저해유형을 보였다.

V. 참고문헌

- Akashi, T., Furuno, T., Takahashi, T., Ayabe, S.I., 1994. Biosynthesis of triterpenoids in cultured cells, and regenerated and wild plant organs of *Taraxacum officinale*. *Phytochemistry* **36**, 303–308.
- Arpadjan, S., Celik, G., Taskesen, S., Gucer, S., 2008. Arsenic, cadmium and lead in medicinal herbs and their fractionation. *Food Chem Toxicol* **46**, 2871–2875.
- Bai, N., He, K., Roller, M., Lai, C.-S., Bai, L., Pan, M.-H., 2015. Flavonolignans and other constituents from *Lepidium meyenii* with activities in anti-inflammation and human cancer cell lines. *J Agric Food Chem* **63**, 2458–2463.
- Boden, G., 1997. Role of fatty acids in the pathogenesis of insulin resistance and NIDDM. *Diabetes* **46**, 3–10.
- Borkosky, S., Valdes, D. A., Bardon, A., Diaz, J. G., Herz, W., 1996. Sesquiterpene lactones and other constituents of *Eirmocephala megaphylla* and *Cyrtocymura cincta*. *Phytochemistry* **42**, 1637–1639.
- Bussemaker, J., 1936. The cholesteretic effect of dandelion. *Naunyn-Schmiedebergs Archiv fur experimentelle Pathologie und Pharmakologie* **181**, 512–513.
- Burrows, S., Simpson, J., 1938. The triterpene alcohols of *Taraxacum* root. The triterpene group Part IV. *J Chem Soc (Part II)*, 2042–2047.
- Ceballos-Picot, I., Witko-Sarsat, V., Merad-Boudia, M., Nguyen, A.T., Thevenin, M., Jaudon, M.C., Zinggraff, J., Verger, C., Jingers, P., Descamps-Latscha, B., 1996. Glutathione antioxidant system as a marker of oxidative stress in chronic renal failure. *Free Radic Biol Med* **21**, 845–853.

- Chang, C.-L., Wang, G.-J., Zhang, L.-J., Tsai, W.-J., Chen, R.-Y., Wu, Y.-C., Kuo, Y.-H., 2010. Cardiovascular protective flavonolignans and flavonoids from *Calamus quiquesetinervius*. *Phytochemistry* **71**, 271–279.
- Chaturvedula, V. S. P., Prakash, I., 2013. Flavonoids from *Astragalus propinquus*. *J Chem Pharm Res* **5**, 261–265.
- Chen, H.-J., Inbaraj, B. S., Chen, B.-H., 2012. Determination of phenolic acids and flavonoids in *Taraxacum formosanum* Kitam by liquid chromatography-tandem mass spectrometry coupled with a post-column derivatization technique. *Int J Mol Sci* **13**, 260–285.
- Cho, S.Y., Park, J.Y., Parl, E.M., Choi, M.S., Lee, M.K., Jeon, S.M., Jang, M.K., Kim, M.J., Park, Y.B., 2002. Alternation of hepatic antioxidant enzyme activities and lipid profile in streptozotocin-induced diabetic rats by supplementation of dandelion water extract. *Clin Chim Acta* **317**, 109–117.
- Choi, J.H., Shin, K.M., Kim, N.Y., Hong, J.P., Lee, Y.S., Kim, H.J., Park, H.J., Lee, K.T., 2002. Taraxinic acid, a hydrolysate of sesquiterpene lactone glycoside from the *Taraxacum coreanum* NAKAI, induces the differentiation of human acute promyelocytic leukemia HL-60 cells. *Biol Pharm Bull* **25**, 1446–1450.
- D'Abrosca, B., DellaGreca, M., Fiorentino, A., Monaco, P., Oriano, P., Temussi, F., 2004. Structure elucidation and phytotoxicity of C₁₃ *nor*-isoprenoids from *Cestrum parqui*. *Phytochemistry* **65**, 497–505.
- Dong, Q. F., Wang, Z., Liu, H. J., Zhang, C. F., He, D. X., Wu, G., Zhang, L., 2011. Flavonoid and other compounds from *Holotrichia diomphalia* larvae. *Chem Nat Compd* **47**, 114–115.
- Du, X., Yoshizawa, T., Shoyama, Y., 1998. Butanoic acid glucoside composition of

- whole body and *in vitro* plantlets of *Anoectochilus formosanus*. *Phytochemistry* **49**, 1925–1928.
- Escandon-Rivera, S., Gonzalez-Andrade, M., Bye, R., Linares, E., Navarrete, A., Mata, R., 2015. α -Glucosidase inhibitors from *Brickellia cavanillesii*. *J Nat Prod* **75**, 968–974.
- Hagymasi, K., Blazovics, A., Lugasi, A., Kristo, SzT., Feher, J., Kery, A., 2000. In vitro antioxidant evaluation of dandelion (*Taraxacum officinale* WEB.) water extracts. *Acta Aliment* **29**, 1–7.
- Hanefeld, M., 1998. The role of acarbose in the treatment of non–insulin-dependent diabetes mellitus. *J Diabetes Complications* **12**, 228–237.
- Hagymasi, K., Blazovics, A., Lugasi, A., Kristo, SzT., Feher, J., Kery, A., 2000. The in vitro effect of dandelions antioxidants on microsomal lipid peroxidation. *Phytother Res* **14**, 43–44.
- Hansel, R., Kartarhardia, M., Huang, J.-T., Bohlmann, F., 1980. Sesquiterpenlactone- β -D-glucopyranoside sowie ein neues eudesmanolid aus *Taraxacum officinale*. *Phytochemistry* **19**, 857–861.
- Hernandez-Galicia, E., Aguilar-Contreras, A., Aguilar-Santamaria, L., Roman-Ramos, R., Chavez-Miranda, A.A., Garcia-Vega, L.M., Flores-Saenz, J.L., Alarcon-Aguilar, F.J., 2002. Studies on hyperglycemic activity of Mexican medicinal plants. In: *Proceedings of the Western Pharmacology Society*, vol. 45, pp. 118–124.
- Hfaiedh, M., Brahmi, D., Zourgui, L., 2016. Hepatoprotective effect of *Taraxacum officinale* leaf extract on sodium dichromate-induced liver injury in rats.

- Environ Toxicol **31**, 339–349.
- Hiermann, A., 1992. *Taraxacum*. In: Hansel, R., Keller, K., Rimpler, H., Schneider, G. (Eds.), *Hagers Handbuch der Pharmazeutischen Praxis*, vol. 6. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, pp. 897–904.
- Ho, C., Choi, E.J., Yoo, G.S., Kim, K.M., Ryu, S.Y., 1998. Desacetylmaticarin, an anti-allergic component from *Taraxacum platycarpum*. *Planta Med* **64**, 577–578.
- Hook, I., McGee, A., Henman, M., 1993. Evaluation of dandelion for diuretic activity and variation in potassium content. *Int. J. Pharmacogn*. **31**, 29–34.
- Hu, C., Kitts, D.D., 2004. Luteolin and luteolin 7-*O*-glucoside from dandelion flower suppress iNOS and COX-2 in RAW264.7 cells. *Mol Cell Biochem* **265**, 107–113.
- Hussain, Z., Waheed, A., Qureshi, R.A., Burdi, D.K., Verspohl, E.J., Khan, N., Hasan, M., 2004. The effect of medicinal plants of Islamabad and Muree region of Pakistan on insulin secretion from INS-1 cells. *Phytother Res* **18**, 73–77.
- Ikeda, Y., Kubo, T., Oda, E., Abe, M., Tokita, S., 2017. Incidence rate and patient characteristics of severe hypoglycemia in treated type 2 diabetes mellitus patients in Japan - retrospective DPC database analysis. *J Diabetes Investig* doi: 10.1111/jdi.12778.
- Ito, A., Kasai, R., Yamasaki, K., Sugimoto, H., 1993. Aliphatic and aromatic glucosides from *Anoectochilus koshunensis*. *Phytochemistry* **33**, 1133–1137.
- Kaltoh, H., Hussain, S., Khan, A., Saad, S.M., Khan, J.A., Khan, K.M., Perveen, S., Choudhary, M.I., 2014. Oxadiazoles and thiadiazoles: Novel α -glucosidase

- inhibitors. *Bioorg Med Chem Lett* **22**, 5454–5465.
- Kashiwada, Y., Takanaka, K., Tsukada, H., Miwa, Y., Taga, T., Tanaka S., Ikeshiro, Y., 2001. Sesquiterpene glucosides from anti-leukotriene B4 release fraction of *Taraxacum officinale*. *J Asian Nat Prod Res* **3**, 191–197.
- Kaurinovic, B., Popovic, M., Cebovic, T., Mimica-Dukic, N., 2003. Effects of *Calendula officinalis* L. and *Taraxacum officinale* WEBER (Asteraceae) extracts on the production of OH• radicals. *Fresenius Environ Bull* **12**, 250–253.
- Kenny, O., Smyth, T. J., Hewage, C. M., Brunton, N. P., McLoughlin P., 2014. 4-Hydroxyphenylacetic acid derivatives of inositol from dandelion (*Taraxacum officinale*) root characterised using LC-SPE-NMR and LC-MS techniques. *Phytochemistry* **98**, 197–203.
- Kenny, O., Smyth, T. J., Hewage, C. M., Brunton, N. P., 2015. Quantitative UPLC-MS/MS analysis of chlorogenic acid derivatives in antioxidant fractionates from dandelion (*Taraxacum officinale*) root. *Int J Food Sci Technol* **50**, 766–773.
- Kim, D.H., Jung, H.A., Sohn, H.S., Kim, J.W., Choi, J.S., 2017. Potential of icariin metabolites from *Epimedium koreanum* Nakai as antidiabetic therapeutic agents. *Molecules* **22**, 986–999.
- Kim, H.M., Lee, E.H., Shin, T.Y., Lee, K.N., Lee, J.S., 1998. *Taraxacum officinale* restores inhibition of nitric oxide production by cadmium in mouse peritoneal macrophages. *Immunopharmacol Immunotoxicol* **20**, 283–297.
- Kim, H.M., Oh, C.H., Chung, C.K., 1999. Activation of inducible nitric oxide synthase by *Taraxacum officinale* in mouse peritoneal macrophages. *Gen*

- Pharmacol **32**, 683–688.
- Kim, H.M., Shin, H.Y., Lim, K.H., Ryu, S.T., Shin, T.Y., Chae, H.J., Kim, H.R.,
Lyu, Y.S., An, N.H., Lim, K.S., 2000. *Taraxacum officinale* inhibits tumor
necrosis factor alpha production from rat astrocytes. Immunopharmacol
Immunotoxicol **22**, 519–530.
- Kisiel, W., Barszcz, B., 2000. Further sesquiterpenoids and phenolics from
Taraxacum officinale. Fitoterapia **71**, 269–273.
- Kisiel, W., Michalska, K., 2005. Sesquiterpenoids and phenolics from *Taraxacum*
hondoense. Fitoterapia **76**, 520–524.
- Ko, S.G., Koh, S.H., Jun, C.Y., Nam, C.G., Bae, H.S., Shin, M.K., 2004. Induction
of apoptosis by *Saussurea lappa* and *Pharbitis nil* on AGS gastric cancer cells.
Biol Pharm Bull **27**, 1604–1610.
- Koo, H.N., Hong, S.H., Song, B.K., Kim, C.H., Yoo, Y.H., Kim, H.M., 2004.
Taraxacum officinale induces cytotoxicity through TNF- α and IL-1 α secretion
in Hep G2 cells. Life Sci **74**, 1149–1157.
- Krentz, A.J. and Bailey, C.J., 2005. Oral antidiabetic agents; Current role in type 2
diabetes mellitus. Drugs **65**, 385–411.
- Lee, S. Y., Moon, E., Kim, S. Y., Lee, K. R., 2013. Quinic acid derivatives from
Pimpinella brachycarpa exert anti-neuroinflammatory activity in
lipopolysaccharide-induced microglia. Bioorg Med Chem Lett **23**, 2140–2144.
- Leung, A.Y., Foster, S., 1996. Dandelion root. In: Encyclopedia of Common
Natural Ingredients Used in Food, Drugs and Cosmetics, second ed. John
Wiley & Sons, New York, pp. 205–207.
- Leu, Y.-L., Shi L.-S., Damu A.G., 2003. Chemical Constituents of *Taraxacum*

- formosanum*. Chem Pharm Bull **51**, 599–601.
- Li, J., Li, X., Xu, W., Wang, S., Hu, Z., Zhang, Q., Deng, X., Wang, J., Zhang, J., Guo, C., 2015. Antifibrotic effects of luteolin on hepatic stellate cells and liver fibrosis by targeting AKT/mTOR/p70S6K and TGF β /Smad signalling pathways. Liver Int **35**, 1222–1233.
- Liu, J., Zhang N., Liu, M., 2014. A new inositol triester from *Taraxacum mongolicum*. Nat Prod Res **28**, 420–423.
- Liu, G., Yang, G., Fang, T., Cai, Y., Wu, C., Wang, J., Huang, Z., Chen, X., 2014. NMR-based metabolomic studies reveal changes in biochemical profile of urine and plasma from rats fed with sweet potato fiber or sweet potato residue. RSC Adv **4**, 23749–23758.
- Michalska, K., Marciniuk, J., Kisiel, W., 2010. Sesquiterpenoids and phenolics from roots of *Taraxacum udum*. Fitoterapia **81**, 434–436.
- Petlevski, R., Hadzija, M., Slijepcevic, M., Juretic, D., 2001. Effect of ‘antidiabetis’ herbal preparation on serum glucose and fructosamine in NOD mice. J Ethnopharmacol **75**, 181–184.
- Petlevski, R., Hadzija, M., Slijepcevic, M., Juretic, D., 2003. Glutathione S-transferases and malondialdehyde in the liver of NOD mice on short-term treatment with plant mixture extract P-9801091. Phytother Res **17**, 311–314.
- Pirtkien, R., Surke, E., Seybold, G., 1960. Vergleichende Untersuchungen uber die choleretische Wirkung verschiedener Arzneimittel bei der Ratte. Die medizinische Welt **26**, 1417–1422.
- Podeschwa, M., Plettenburg, O., vom Brocke, J., Block, O., Adelt, S., Altenbach,

- H.J., 2003. Stereoselective synthesis of *myo*-, *neo*-, L-*chiro*, D-*chiro*, *allo*-, *scyllo*-, and *epi*-inositol systems via conduritols prepared from *p*-benzoquinone. Eur J Org Chem **2003**, 1958–1972.
- Racz-Kotilla, E., Rácz, G., Solomon, A., 1974. The action of *Taraxacum officinale* extracts on the body weight and diuresis of laboratory animals. Planta Med **26**, 212–217
- Ribeiro, D., Freitas, M., Tomé, S. M., Silva, A. M. S., Porto, G., Fernandes, E., 2013. Modulation of human neutrophils' oxidative burst by flavonoids. Eur J Med Chem **67**, 280–292.
- Ripsin, C.M., Kang, H., Urban, R.J., 2009. Management of Blood Glucose in Type 2 Diabetes Mellitus. Am Fam Physician **79**, 29-36.
- Rofi R.D., Pomilio, A. B., 1985. 5,7,3'-trihydroxy-4',5'-dimethoxyflavone and other phenolics from *Poa Huecu*. Phytochemistry **24**, 2131–2132.
- Satoh, T., Igarashi, M., Yamada, S., Takahashi, N., Watanabe, K., 2015. Inhibitory effect of black tea and its combination with acarbose on small intestinal α -glucosidase activity. J Ethnopharmacol **161**, 147–155.
- Schutz, K., Carle, R., Schieber, A., 2006. Taraxacum-A review on its phytochemical and pharmacological profile. J Ethnopharmacol. 107, 313–323.
- Seco, J.M., Quinoa, E., Riguera, R., 2004. The assignment of absolute configuration by NMR. Chem Rev **104**, 17–117.
- Seo, S.W., Koo, H.N., An, H.J., Kwon, K.B., Lim, B.C., Seo, E.A., Ryu, D.G., Moon, G., Kim, H.Y., Kim, H.M., Hong, S.H., 2005. *Taraxacum officinale* protects against cholecystokinin-induced acute pancreatitis in rats. World J

Gastroenterol **11**, 597–599.

- Shi, S., Zhang, Y., Zhao, Y., Huang, K., 2008a. Preparative isolation and purification of three flavonoid glycosides from *Taraxacum mongolicum* by high-speed counter-current chromatography. J Sep Sci **31**, 683–688.
- Shi, S., Zhao, Y., Zhou, H., Zhang, Y., Jiang, X., Huang, K., 2008b. Identification of antioxidants from *Taraxacum mongolicum* by high-performance liquid chromatography-diode array detection-radical-scavenging detection-electrospray ionization mass spectrometry and nuclear magnetic resonance experiments. J Chromatogr A **1209**, 145–152.
- Shi, S., Zhou, H., Zhang, Y., Zhao, Y., Huang, K., Liu, S., 2009. A high-speed counter-current chromatography-HPLC-DAD method for preparative isolation and purification of two polymethoxylated flavones from *Taraxacum mongolicum*. J Chromatogr Sci **47**, 349–353.
- Sweeny, B., Vora, M., Ulbricht, C., Basch, E., 2005. Evidence-based systematic review of dandelion (*Taraxacum officinale*) by natural standard research collaboration. J Herb Pharmacother **5**, 79–93.
- Tanaka, T., Nakashima, T., Ueda, T., Tomii, K., Kouno, I., 2007. Facile discrimination of aldose enantiomers by reversed-phase HPLC. Chem Pharm Bull **55**, 899–901.
- Takahashi, H., Kittaka, H., Ikegami, S., 2001. Novel synthesis of enantiomerically pure natural Inositols and their diastereoisomers. J Org Chem. **66**, 2705–2716.
- Turner, A., Chen, S.-N., Joiike, M. K., Pendland, S. L., Pauli, G. F., Farnsworth, N. R., 2005. Inhibition of Uropathogenic Escherichia coli by cranberry juice: a

- new antiadherence assay. *J Agric Food Chem* **53**, 8940–8947.
- Ullrich, S.F., Averagesch, N.J.H., Castellanos, L., Choi, Y.H., Rothauer, A., Kayser, O., 2016. Discrimination of wild types and hybrids of *Duboisia myoporoides* and *Duboisia leichhardtii* at different growth stages using ¹H NMR-based metabolite profiling and tropane alkaloids-targeted HPLC-MS analysis. *Phytochemistry* **131**, 44–56.
- van de Laar, .F.A., Lucassen, P.L., Akkermans, R.P., van de Lisdonk, E.H., Rutten, G.E., van Weel, C., 2005. α -Glucosidase inhibitors for patients with type 2 diabetes. *Diabetes care* **28**, 154–163.
- Vichayanrat, A., Ploybutr, S., Tunlakit, M., Watanakejorn, P., 2002. Efficacy and safety of voglibose in comparison with acarbose in type 2 diabetic patients. *Diabetes Res Clin Pract* **55**, 99–103.
- Vuckovic, I., Rapinoja, M.L., Vaismaa, M., Vannien, P., Koskelab, H., 2016. Application of comprehensive NMR-based analysis strategy in annotation, isolation and structure elucidation of low molecular weight metabolites of *Ricinus communis* seeds. *Phytochem Anal* **27**, 64–72.
- Wang, P., Kong, F., Wei, J., Wang, Y., Wang, W., Hong, K., Zhu, W., 2014. Alkaloids from the mangrove-derived actinomycete *Jishengella endophytica* 161111. *Mar Drugs* **12**, 477–490.
- Warashina, T., Umehara, K., Miyase, T., 2012. Constituents from the roots of *Taraxacum platycarpum* and their effect on proliferation of human skin fibroblasts. *Chem Pharm Bull* **60**, 205–212.
- Weiss, R.F., Fintelmann, V., 2000. *Taraxacum officinale*, Dandelion. In: *Herbal*

- Medicine, second ed. revised and expanded. Thieme, Stuttgart, New York, pp. 123–125, 244–246.
- Williams, C.A., Goldstone, F., Greenham, J., 1996. Flavonoids, cinnamic acids and coumarins from the different tissues and medicinal preparations of *Taraxacum officinale*. *Phytochemistry* **42**, 121–127.
- Wirngo, F.E., Lambert, M.N., Jeppsen, P.B., 2016. The physiological effects of dandelion (*Taraxacum officinale*) in type 2 diabetes. *Rev Diabet Stud* **13**, 113–131.
- Wolbis, M., Krolikowska, M., Bednarek, P., 1993. Polyphenolic compounds in *Taraxacum officinale*. *Acta Pol Pharm -Drug Res* **50**, 153–158
- Xie, H., Wang, T., Matsuda, H., Morikawa, T., Yoshikawa, M., Tani, T., 2005. Bioactive constituents from Chinese natural medicines. Inhibitory effect on aldose reductase and structures of Saussureosides A and B from *Saussurea medusa*. *Chem Pharm Bull* **53**, 1416–1422.
- Yan, Z.-H., Han, Z.-Z., Hu, X.-Q., Liu, Q.-X., Zhang, W.-D., Liu, R.-H., Li, H.-L., 2013. Chemical constituents of *Euonymus alatus*. *Chem Nat Compd* **49**, 340–342.
- Yang, H., Jeong, E. J., Kim, J., Sung, S. H., Kim, Y. C., 2011. Antiproliferative Triterpenes from the Leaves and Twigs of *Juglans sinensis* on HSC-T6 Cells. *J. Nat. Prod.* **74**, 751–756.
- Yasukawa, K., Akihisa, T., Inoue, Y., Tamura, T., Yamanouchi, S., Takido, M., 1998. Inhibitory effect of the methanol extracts from Compositae plants on 12-*O*-tetradecanoylphorbol-13-acetate-induced ear oedema in mice. *Phytother. Res.* **12**, 484–487.

- Yun, S.O., Cho, H.R., Choi, H.S., 2002. Anticoagulant from *Taraxacum platycarpum*. *Biosci. Biotechnol. Biochem.* **66**, 1859–1864.
- Zhang, Y., Gao, H., Liu, R., Liu, J., Chen, L., Li, X., Zhao, L., Wang, W., Li, B., 2017. Quinazoline-1-deoxynojirimycin hybrids as high active dual inhibitors of EGFR and α -glucosidase. *Bioorg Med Chem Lett.* **27**, 4309–4313.
- Zhang, Y., Xia, Y., Lai, Y., Tang, F., Luo, Z., Xue, Y., Yao, G., Zhang, Y., Zhang, J., 2014. Efficient synthesis of kinsenoside and goodyeroside A by a chemo-enzymatic approach. *Molecules* **19**, 16950–16958.
- Zidorn, C., Ellmerer-Muller, E. P., Stuppner, H., 1999. Eudesmanolides and inositol derivatives from *Taraxacum linearisquameum*. *Phytochemistry* **51**, 991–994.

국문초록

당뇨는 현대인의 심각한 질병 중 하나이며, 만성 대사성 질환이다. 당 대사가 제대로 진행되지 않아 고혈당을 유발하고 이는 결국 많은 장기의 손상을 초래한다. 당뇨병은 두 가지 형태로 나뉘는데 인슐린 부족으로 인한 1형 당뇨와 비인슐린 의존성인 2형 당뇨로 나뉜다. 이중 2형 당뇨의 경우, 전체 당뇨병환자의 약 90%를 차지한다. 2형 당뇨의 치료법 중에 알파글루코시데이즈를 억제하는 방법이 있다. 이는 탄수화물을 소장에서 분해하여 흡수하는 것을 억제함으로써 결과적으로 혈당을 낮추는 것이다. 현재 사용되는 알파글루코시데이즈 억제제는 acarbose나 voglibose 등이 있다. 하지만 이들은 모두 설사와 같은 위장장애를 유발하는 부작용이 있다.

포공영은 다년생 국화과 (Compositae) 식물로, 기원식물로는 주로 민들레 (*Taraxacum platycarpum*)과 서양민들레 (*T. officinale*)가 있다. 민들레속 식물은 전세계에 널리 분포되어 있는데 특히 서양민들레의 경우 과거 유럽지역에 자생하던 식물이지만 현재는 동아시아 쪽에도 많이 분포되고 있다. 민들레의 전체부분은 예로부터 야채나 약재로 사용되어 왔는데 황달, 이담, 이뇨, 항당뇨, 항염증 등의 용도로 많이 사용하였다. 이를 토대로 많은 생리활성 연구와 식물화학적 연구가 진행, 보고 되었다. 특히 당뇨병과 관련된 연구로 phytosterols, sesquiterpene lactones, flavonoids 과 phenolic acids 등이 항당뇨활성과 관련된 화합물이

라는 것이 보고되어 있다. 이에 본 연구는 서양민들레에 대해 식물화학적 연구를 진행하였고, 이들의 알파글루코시데이즈 억제활성을 확인하였다.

민들레 전체를 메탄올로 추출하여, 추출물을 극성별로 *n*-Hexane, CHCl₃, EtOAc, *n*-BuOH 및 물 분획물로 나누고 CHCl₃, EtOAc, *n*-BuOH 세 분획물에 대하여 여러 크로마토그래피법을 사용하여 분리를 실시하였다. 그 결과, 3종의 butyrolactones (**1-3**), 3종의 butanoates (**4-6**), 8종의 inositols (**7-14**), 14종의 flavonoids (**15-28**), 3종의 sesquiterpenes (**29-31**), 5종의 megastigmanes (**32-36**) 그리고 10종의 기타화합물들(**37-49**)을 분리하였다. 분리된 49종의 화합물을 이들의 성상 및 각종 분광학적 방법을 통해 그 구조를 taraxiroside A-E (**1-6**), 1D-1,2-di-*O*-4-hydroxyphenylacetyl-*chiro*-inositol (**7**), 1D-1,3-di-*O*-4-hydroxyphenylacetyl-*chiro*-inositol (**8**), 1D-1,2,3-tri-*O*-4-hydroxyphenylacetyl-*chiro*-inositol (**9**), 1,2,5-tri-*O*-4-hydroxyphenyl acetyl-*L*-*chiro*-inositol (**10**), 1D-4,5,6-tri-*O*-4-hydroxyphenylacetyl-*chiro*-inositol (**11**), 1D-1,5-di-*O*-4-hydroxyphenylacetyl-*chiro*-inositol (**12**), 1,4-di-*O*-4-hydroxyphenylacetyl-*neo*-inositol (**13**), 1D-1,4-di-*O*-4-hydroxyphenylacetyl-*chiro*-inositol (**14**), phloridzin-5'-methylproline (**15**), chrysoeriol (**16**), 5,7,3'-hydroxy-4',5'-dimethoxy flavone (**17**), 5,7,4'-hydroxy-3',5'-dimethoxy flavone (**18**), luteolin (**19**), calquiquelignan D (**20**), tricin 4'-*O*-[threo- β -guaiacyl-(7''-*O*-methyl)-glyceryl] ether (**21**), tricin 4'-*O*-[erythro- β -guaiacyl-(7''-*O*-methyl)-glyceryl] ether (**22**), calquiquelignan E (**23**), phloridzin (**24**), luteolin-7-*O*-rutinoside (**25**), isorhamnetin 3-*O*- α -D-xylopyranosyl-(1 \rightarrow 2)- β -D-glucopyranoside (**26**), luteolin-7-*O*- β -D-

glucopyranosyl-(1'''→6'')-O-β-D-glucopyranoside (27), luteolin-7-O-β-D-glucopyranoside (28), 11β,13-dihydrotaraxinic acid 1'-O-β-D-glucopyranoside (29), taraxinic acid 1'-O-β-D-glucopyranoside (30), 3β-hydroxy-4αH-3-dihydrosantamarine-β-D-glucopyranoside (31), annuionone D (32), 3,4-dihydroxy-5,7-megastigmadien-9-one (33), komaroveside A (34), 6S,9R-roseoside (35), 6S,9S-roseoside (36), methyl 3,4-dihydroxycinnamate (37), 3-glycerindole (38), loliolide (39), epilololide (40), nicotinamide (41), adenosine (42), aesculetin-7-O-β-D-glucopyranoside (43), syringin (44), dihydrosyringin (45), lycoperodine-1 (46), methyl (S)-pyroglutamate (47), 5-(hydroxymethyl)furfural (48), phenylalanine (49) 으로 동정하였으며, 이중 화합물 1-9, 15 은 천연에서 처음으로 분리보고 되는 물질이다.

분리한 49종의 화합물에 대하여 알파글루코시데이즈 억제활성을 확인한 결과, 화합물 1-12, 15-19, 24 가 positive control인 acarbose (IC₅₀ 179.9 μM) 와 유사한 활성을 나타냈으며, 특히 화합물 9-11, 19, 24 는 더욱 우수한 억제활성을 보였다 (IC₅₀ 39.8- 86.7 μM). 이들의 억제 유형을 알아보기 위해 Lineweaver-Burk plot을 사용하였고 화합물 2, 19, 24 는 mixed-type 억제였으며 화합물 9-11은 acarbose와 같이 경쟁적 저해를 하였다.

주요어: 포공영, *Taraxacum officinale*, butyrolactone, butanoate, inositol, 알파글루코시데이즈 억제

학번: 2011-30510

부록

Supplementary information

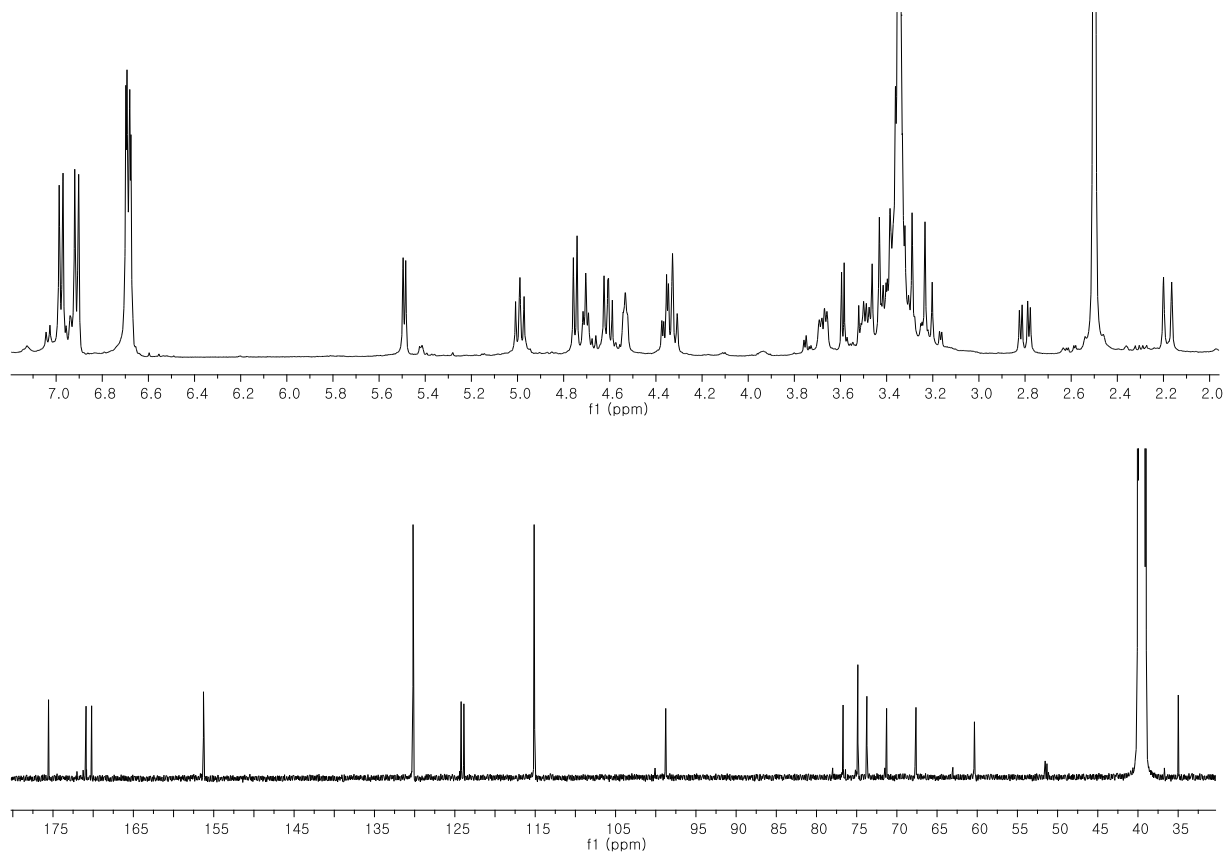


Fig. S1. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **1**

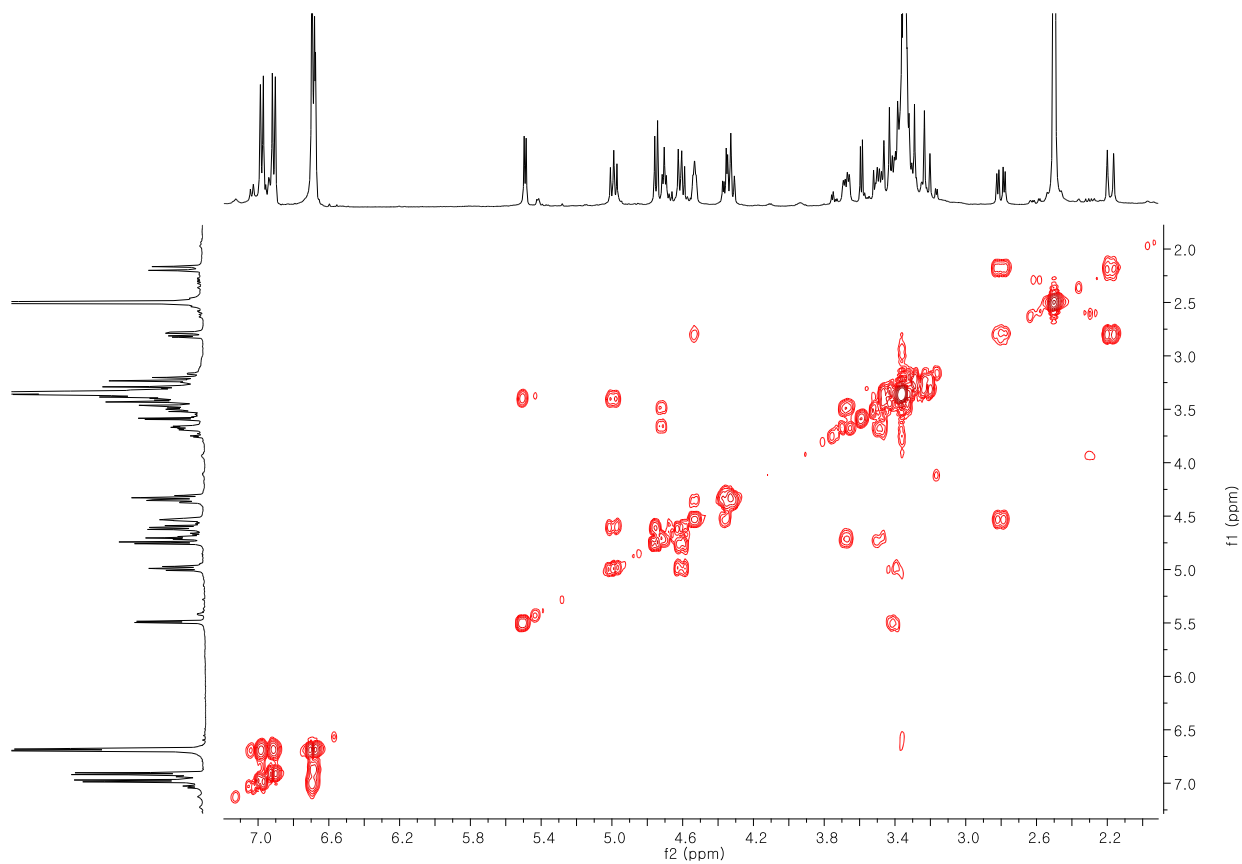


Fig. S2. ^1H - ^1H COSY spectrum of compound **1**

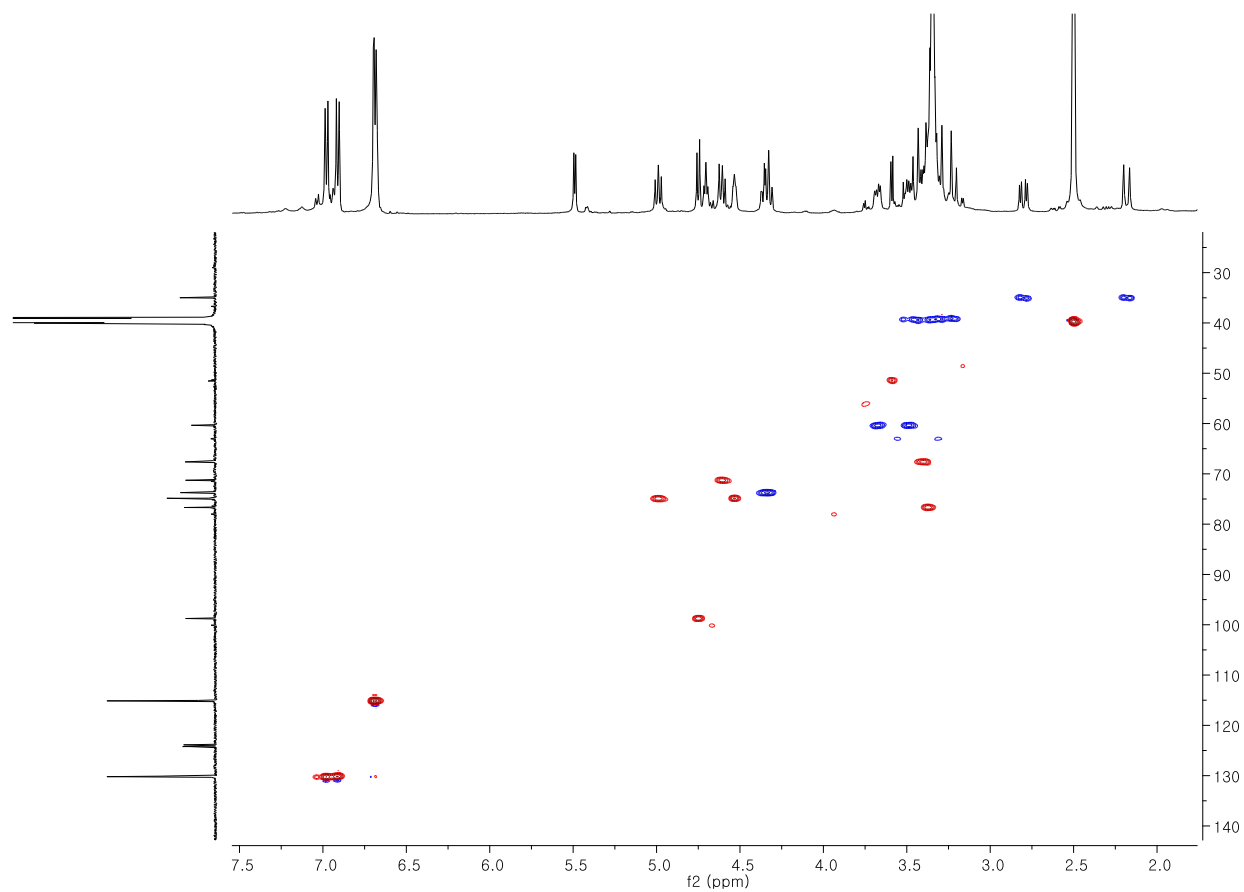


Fig. S3. HSQC spectrum of compound **1**

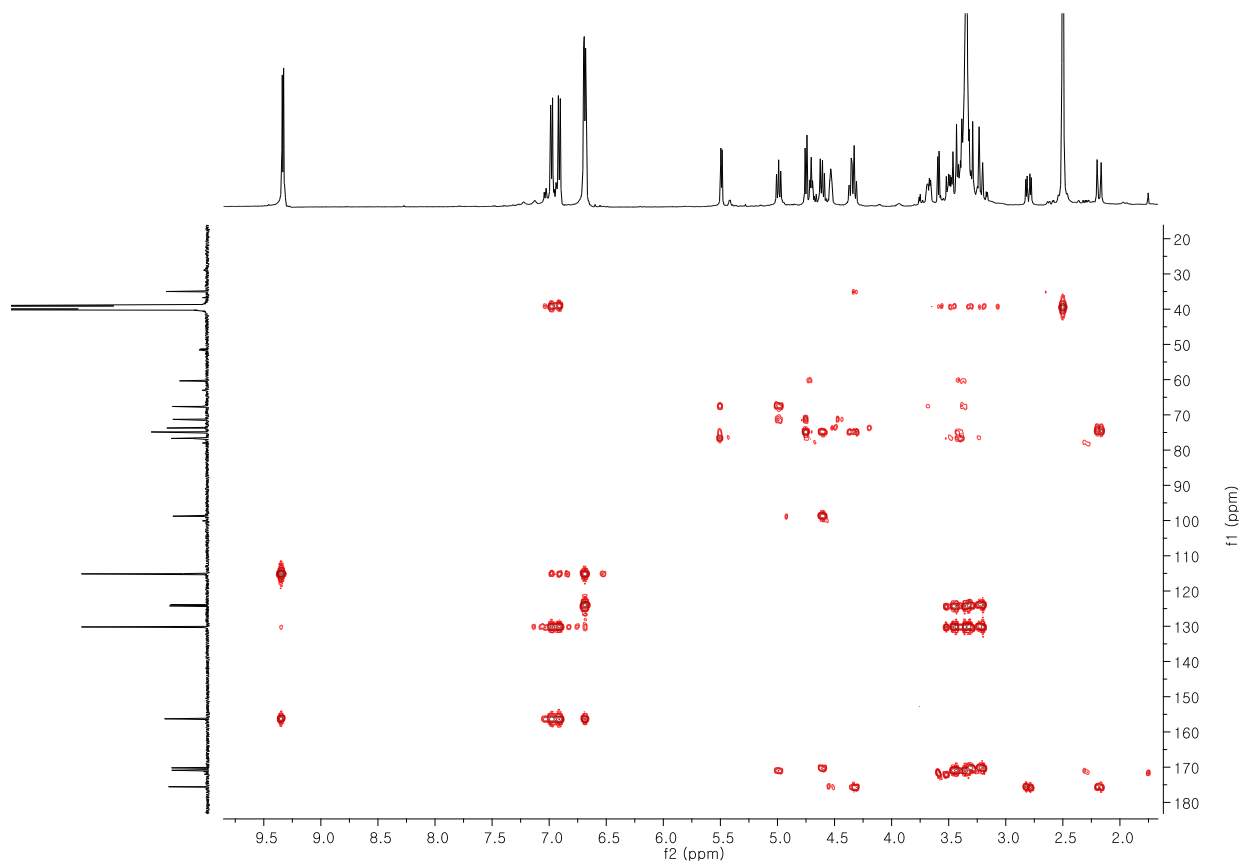


Fig. S4. HMBC spectrum of compound **1**

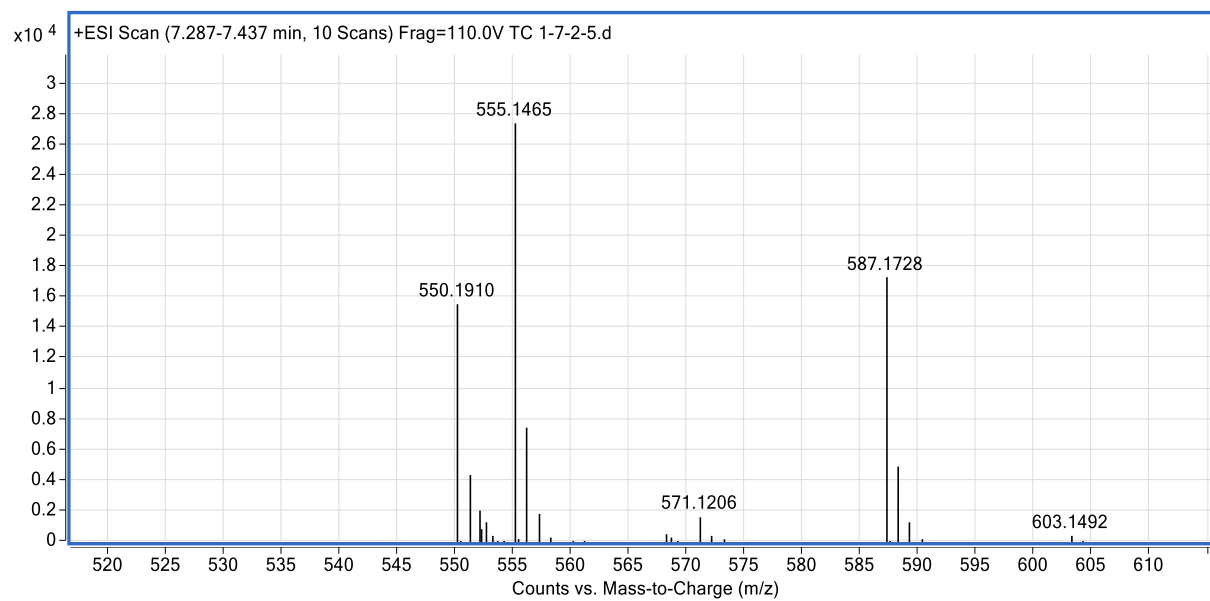


Fig. S5. MS spectrum of compound **1**

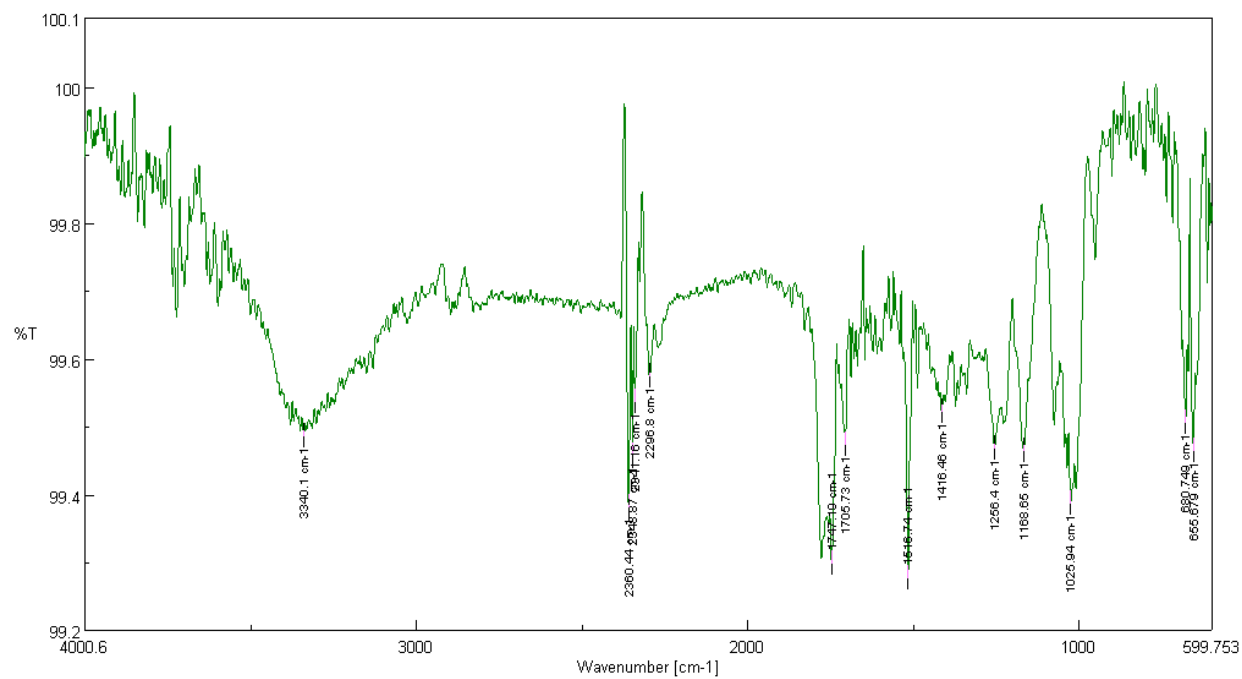
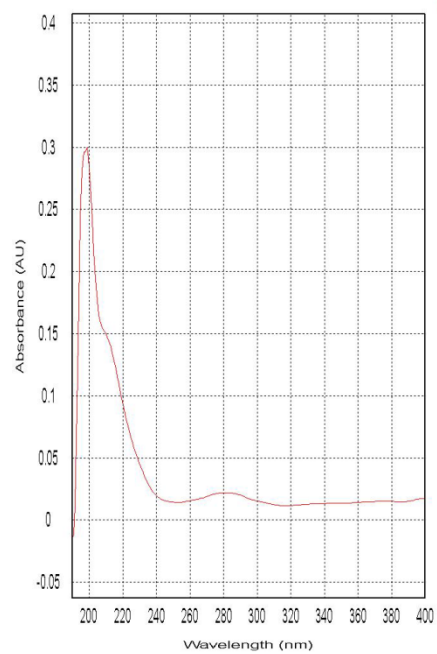


Fig. S6. UV, IR spectra of compound **1**

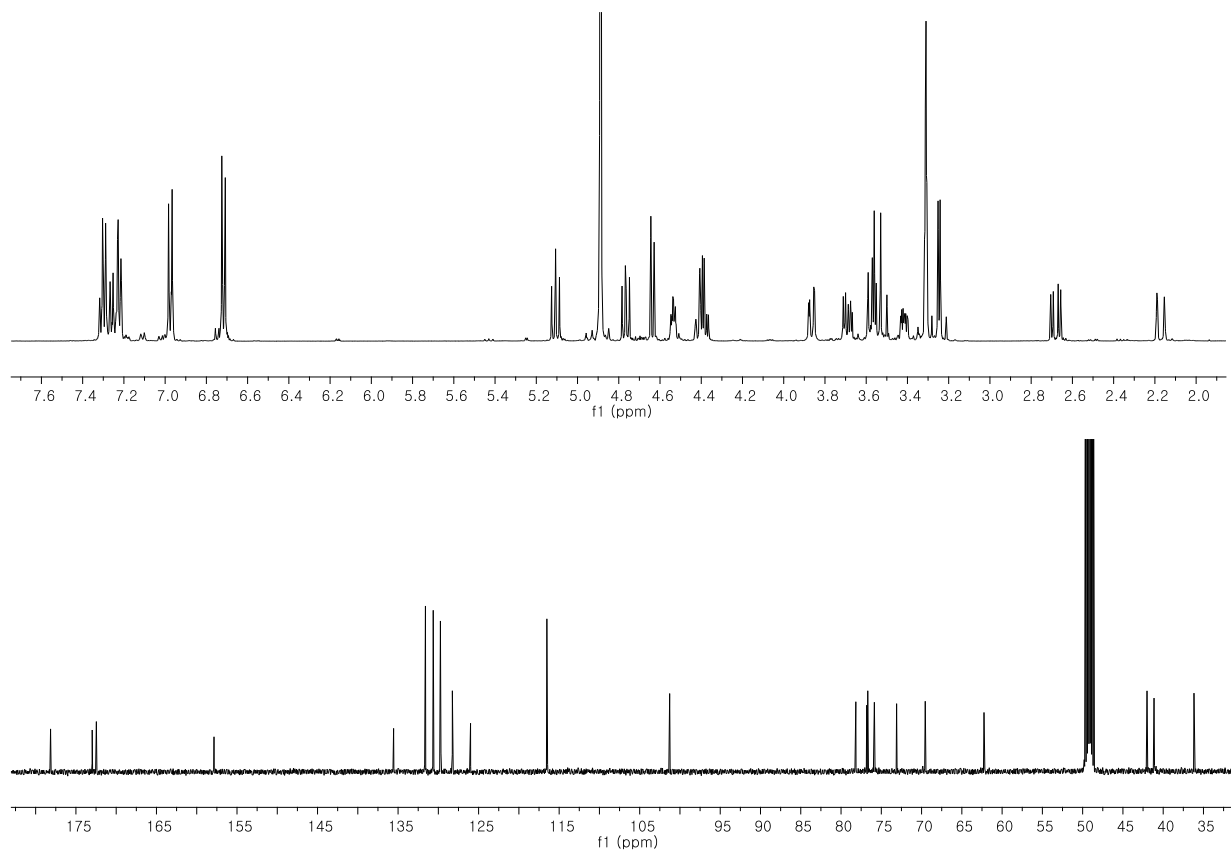


Fig. S7. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **2**

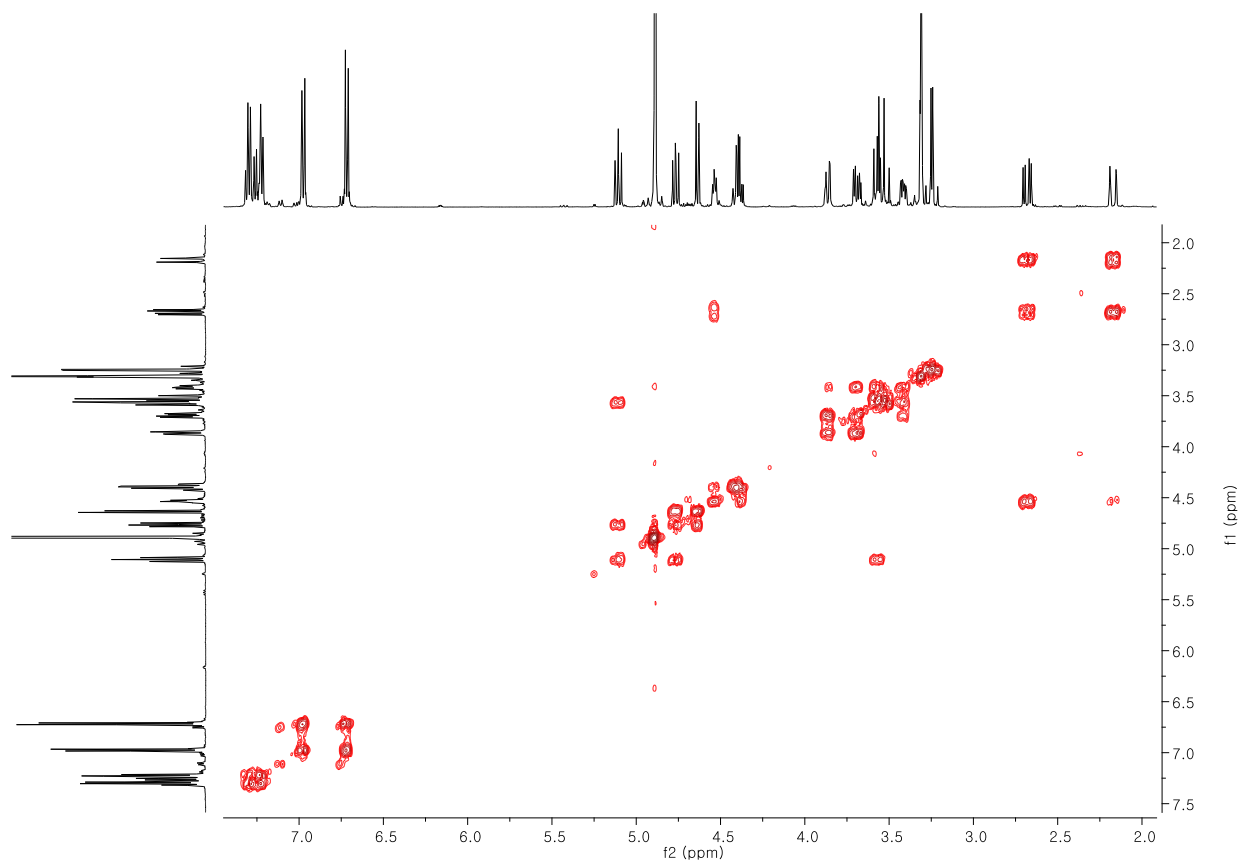


Fig. S8. ^1H - ^1H COSY spectrum of compound **2**

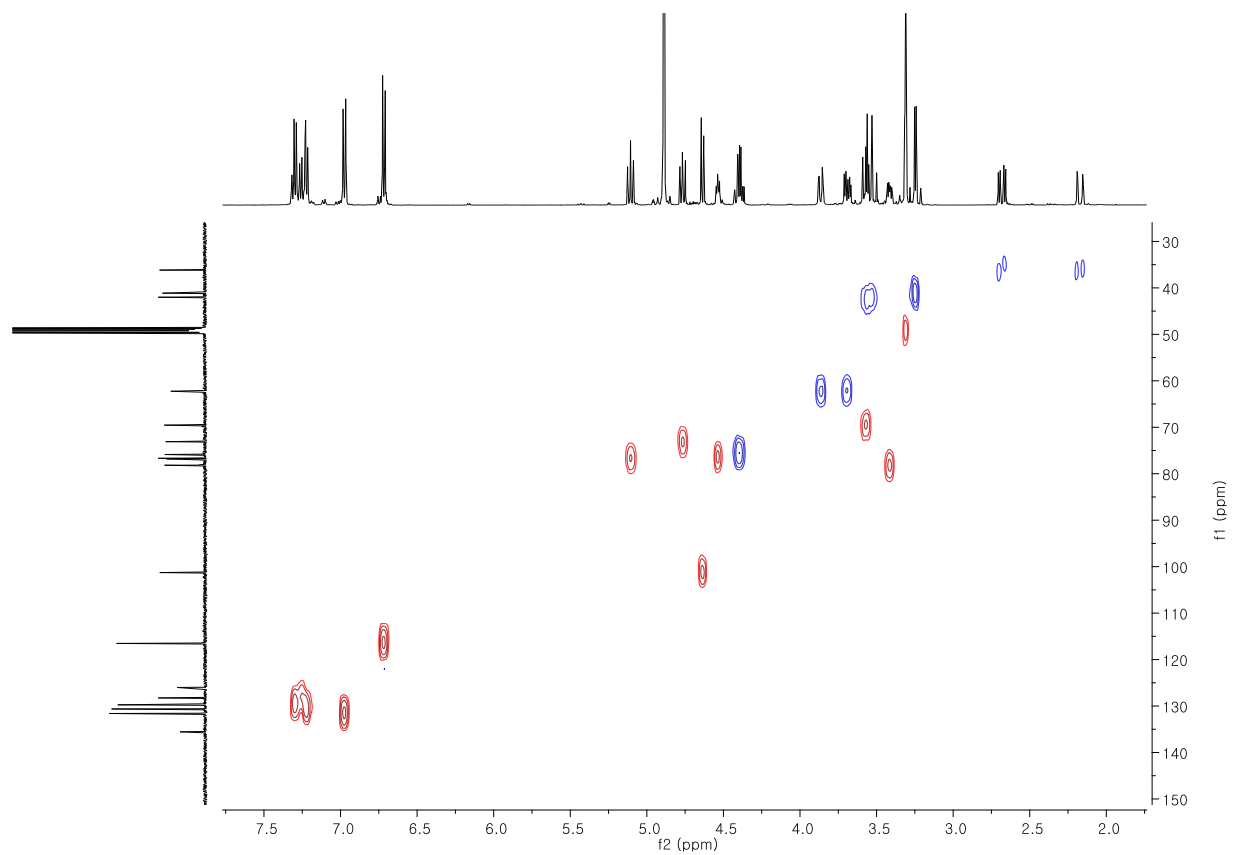


Fig. S9. HSQC spectrum of compound **2**

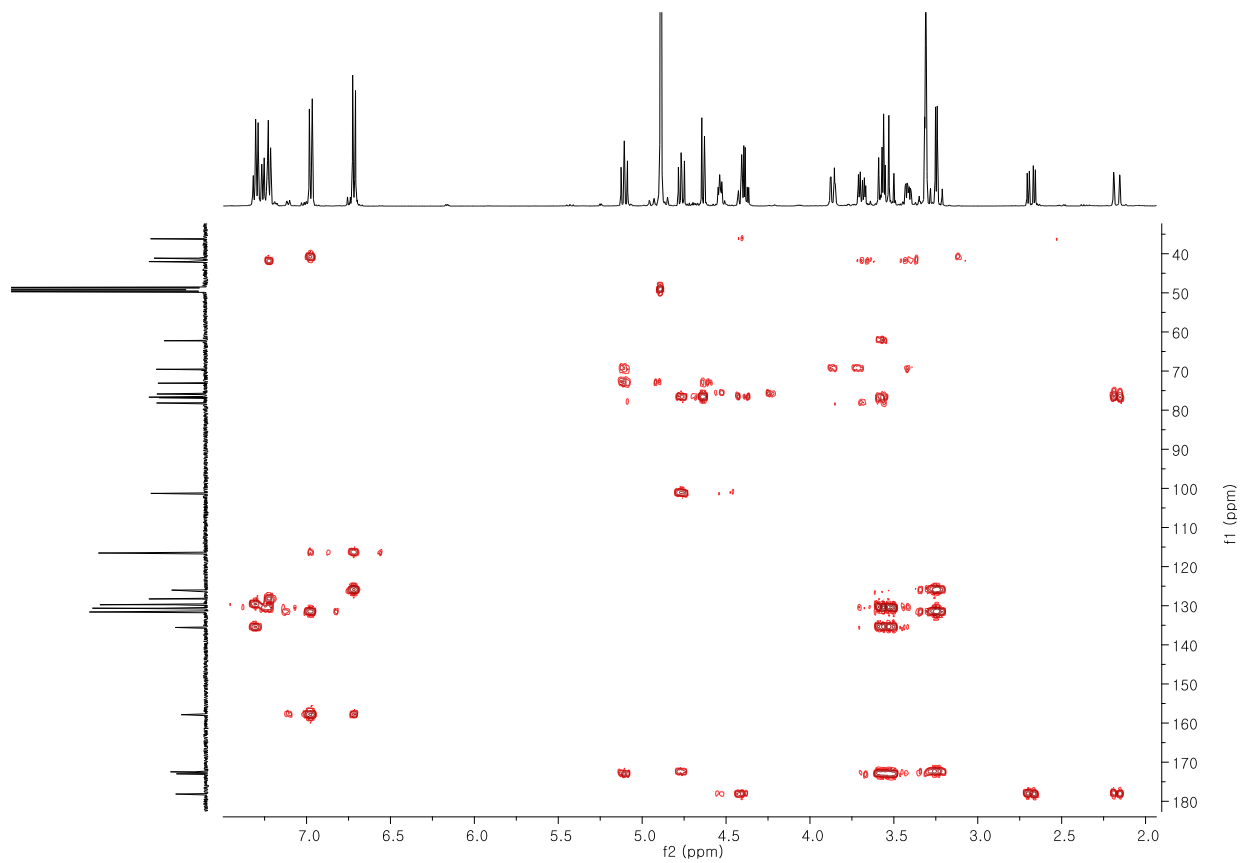


Fig. S10. HMBC spectrum of compound **2**

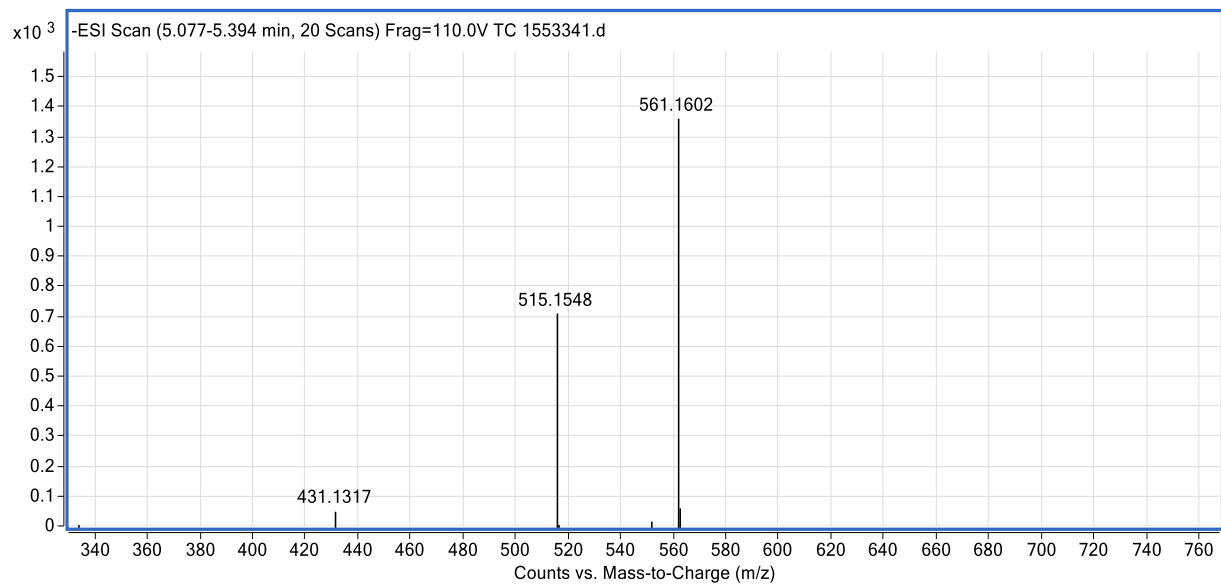


Fig. S11. MS spectrum of compound **2**

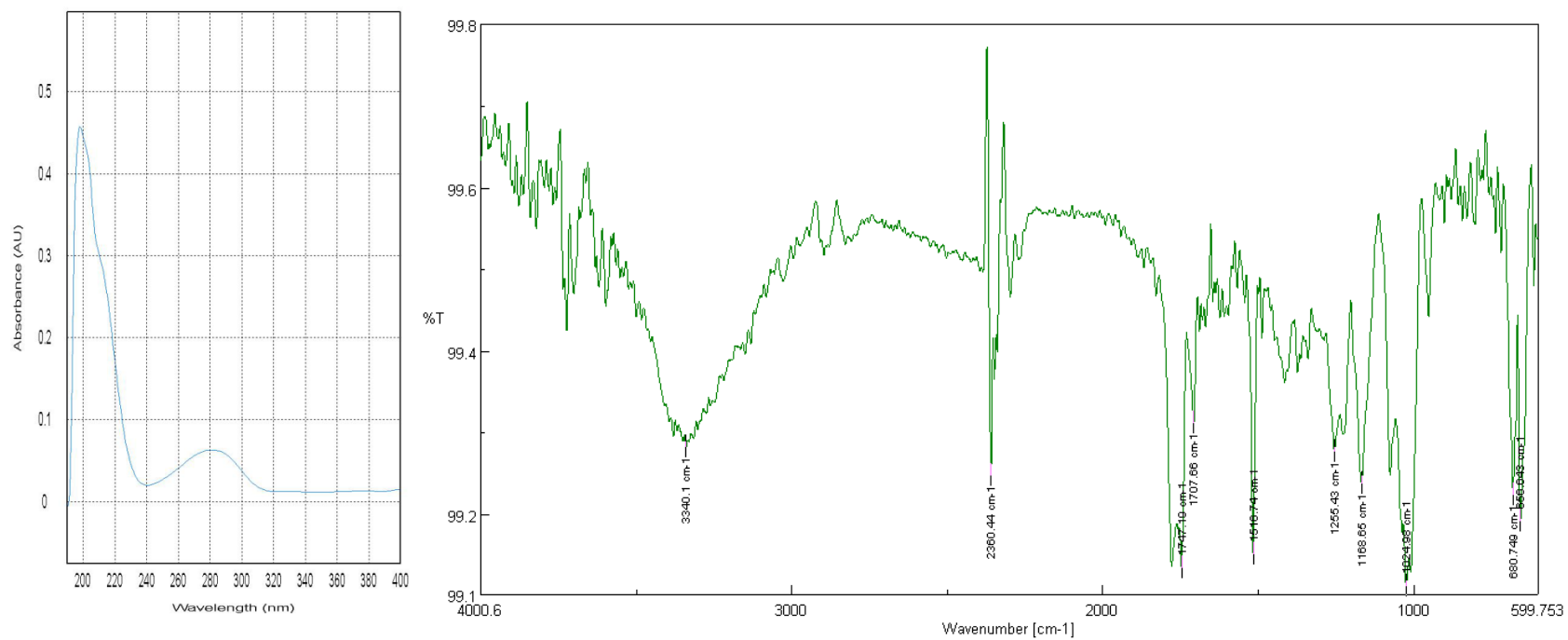


Fig. S12. UV, IR spectra of compound **2**

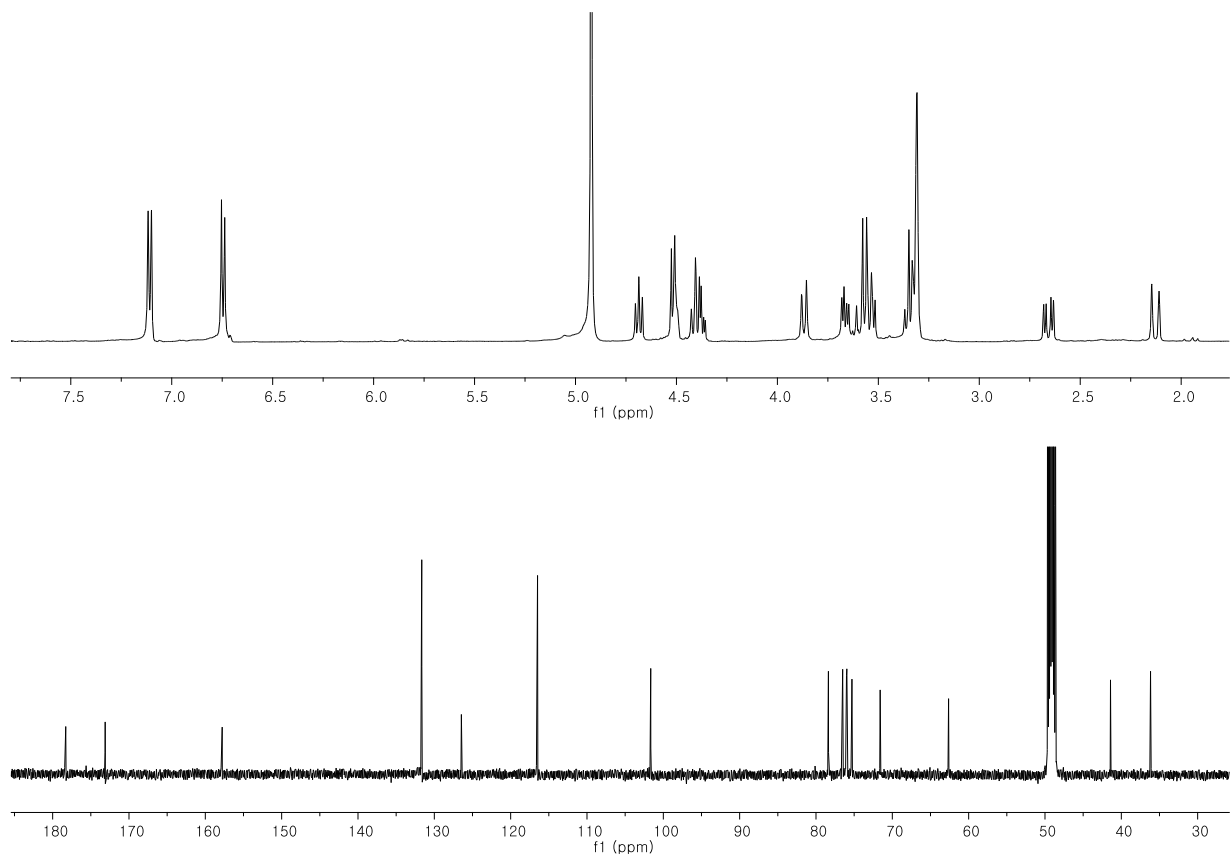


Fig. S13. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **3**

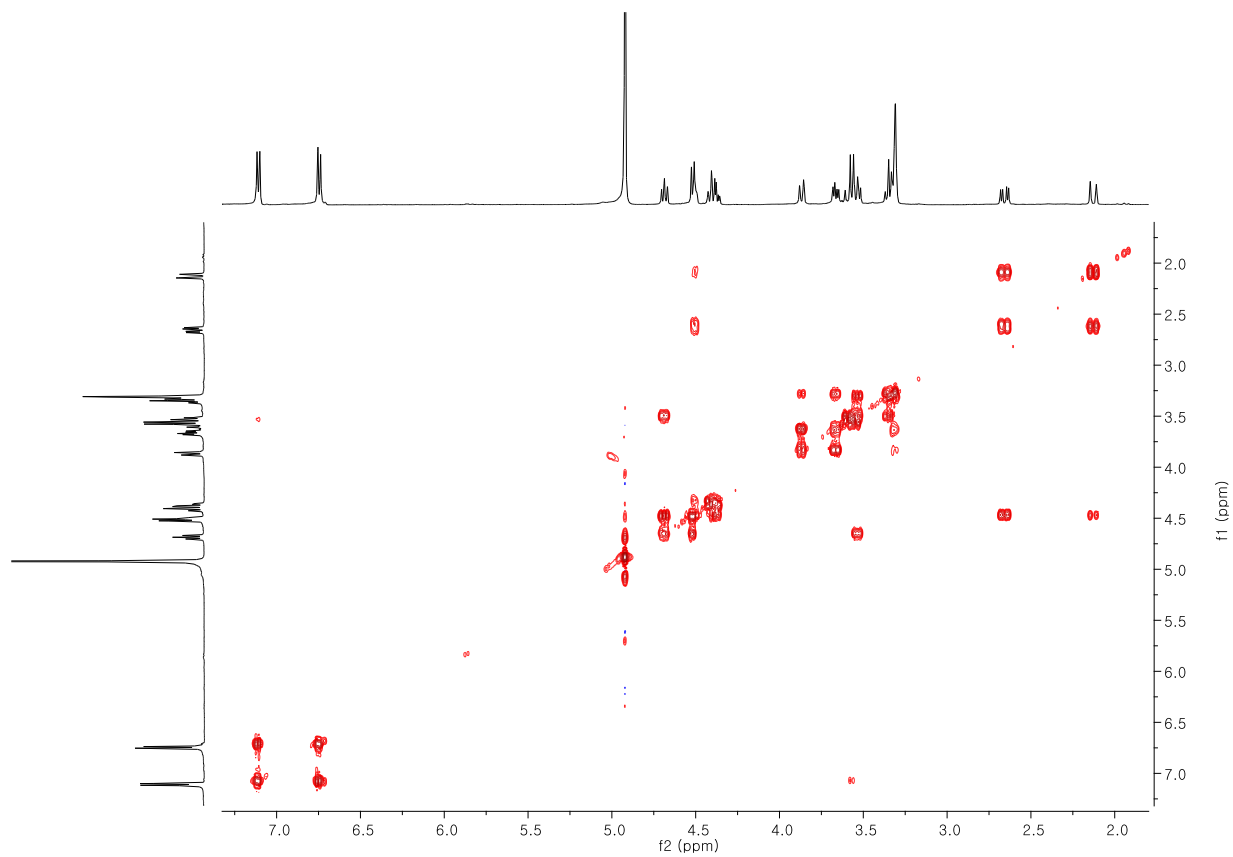


Fig. S14. ^1H - ^1H COSY spectrum of compound **3**

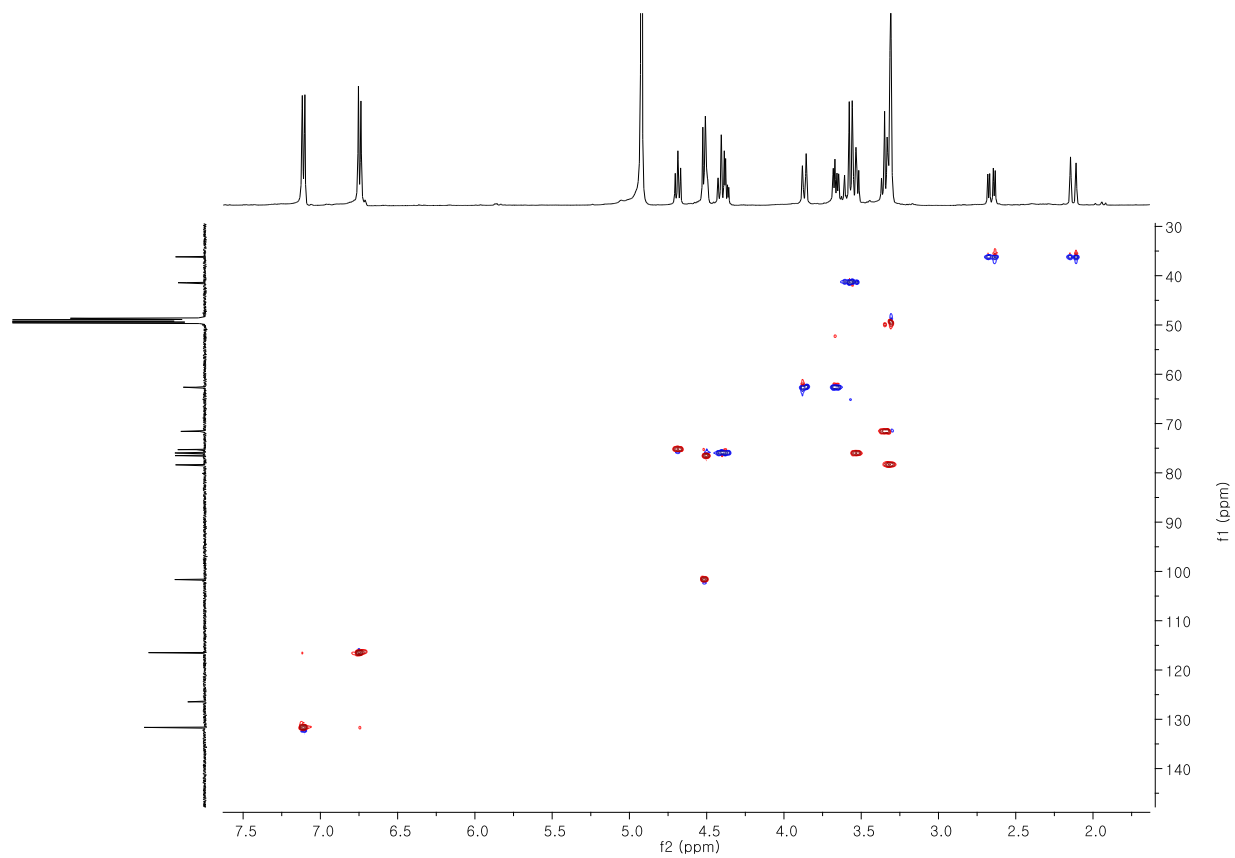


Fig. S15. HSQC spectrum of compound **3**

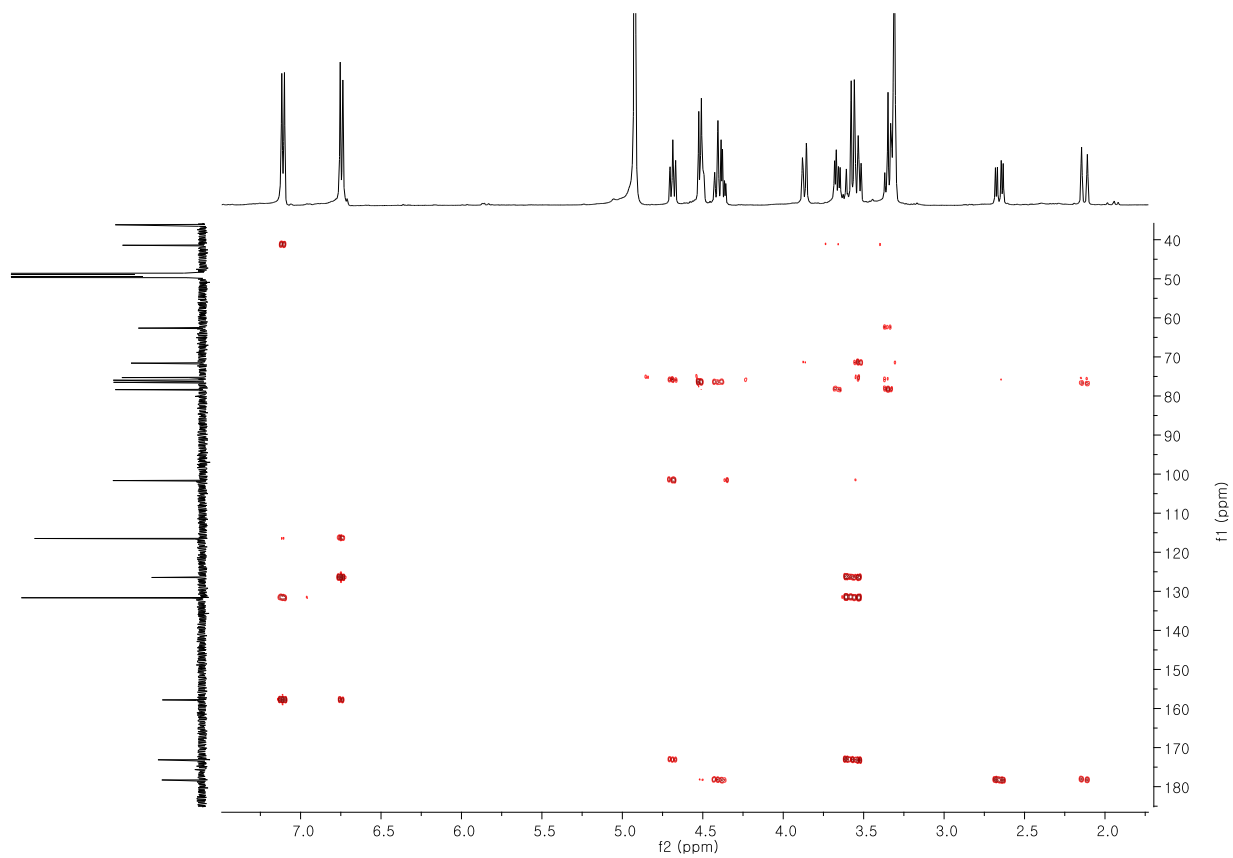


Fig. S16. HMBC spectrum of compound **3**

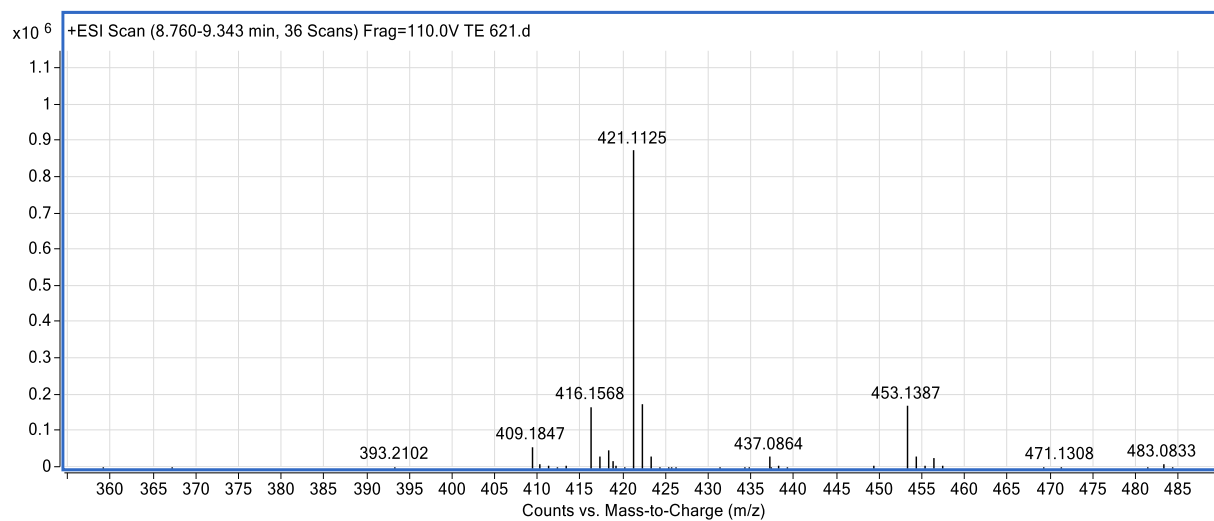


Fig. S17. MS spectrum of compound **3**

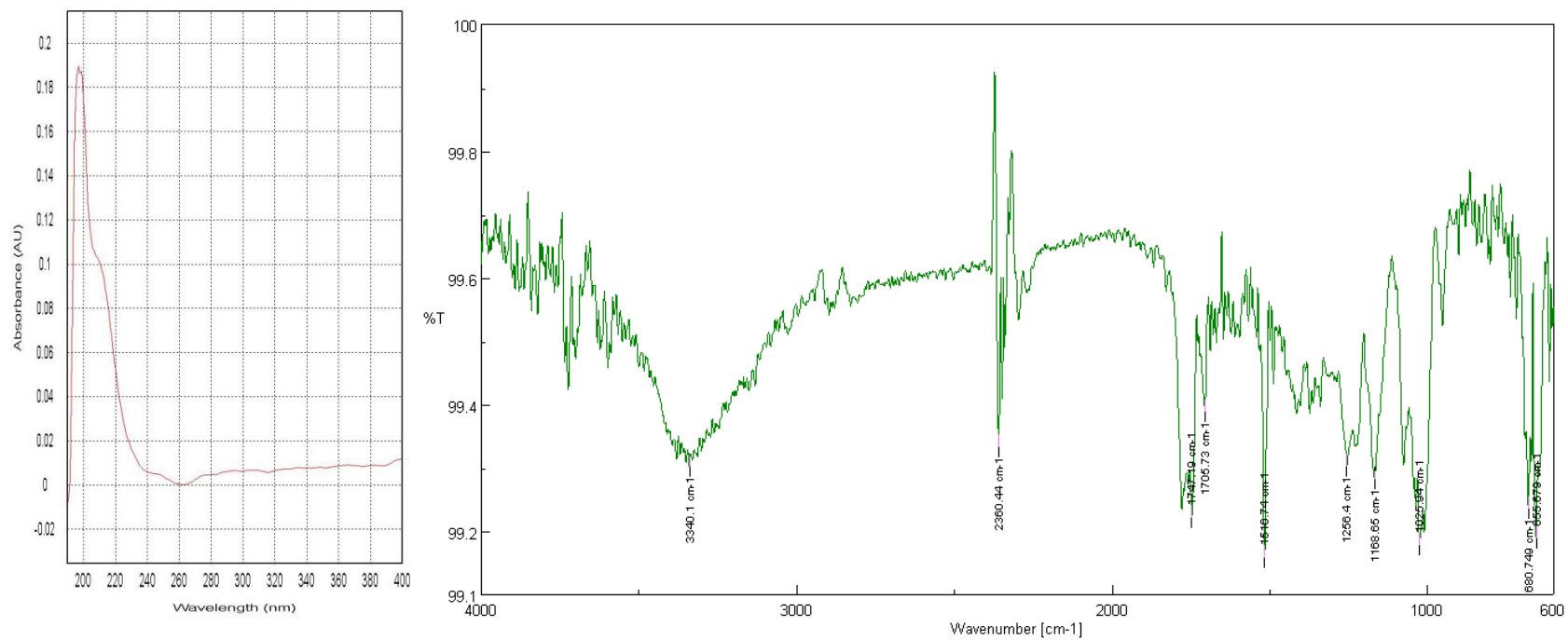


Fig. S18. UV, IR spectra of compound **3**

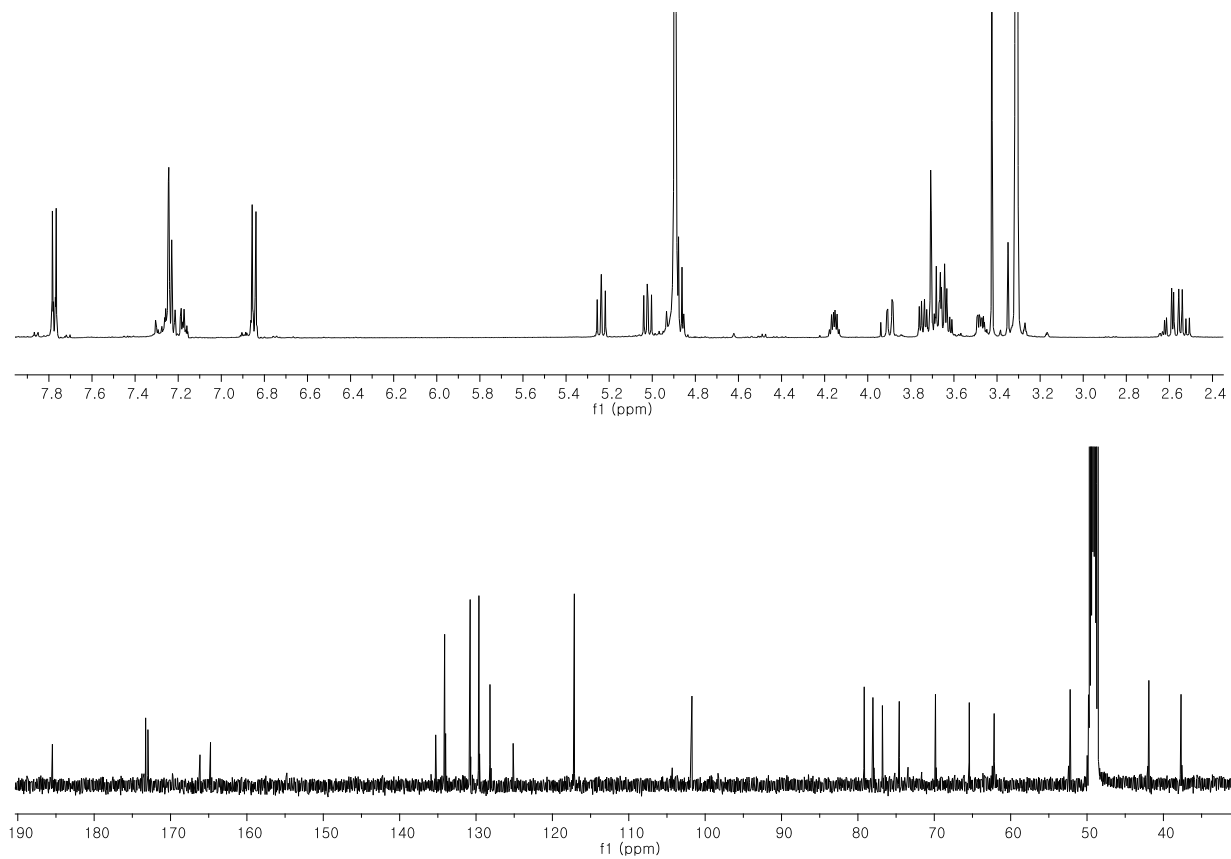


Fig. S19. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **4**

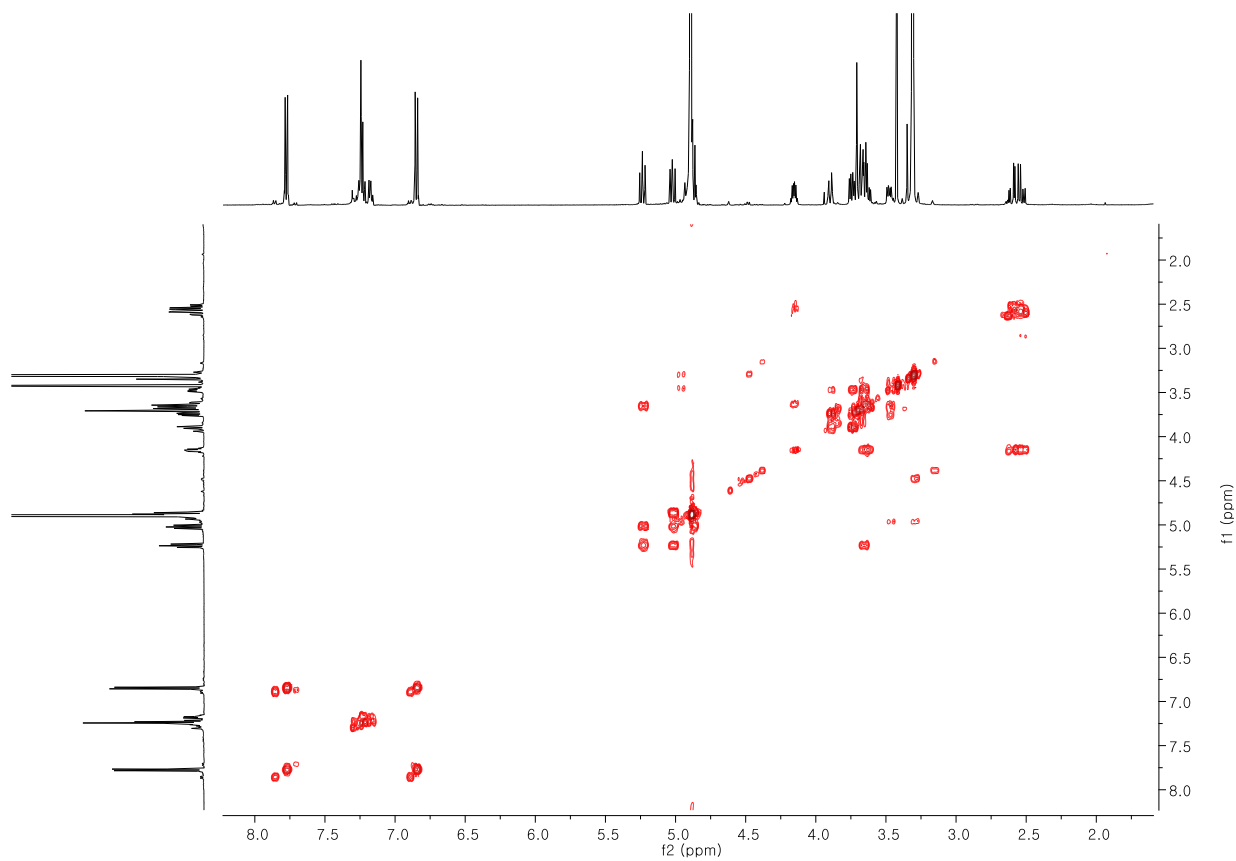


Fig. S20. ^1H - ^1H COSY spectrum of compound **4**

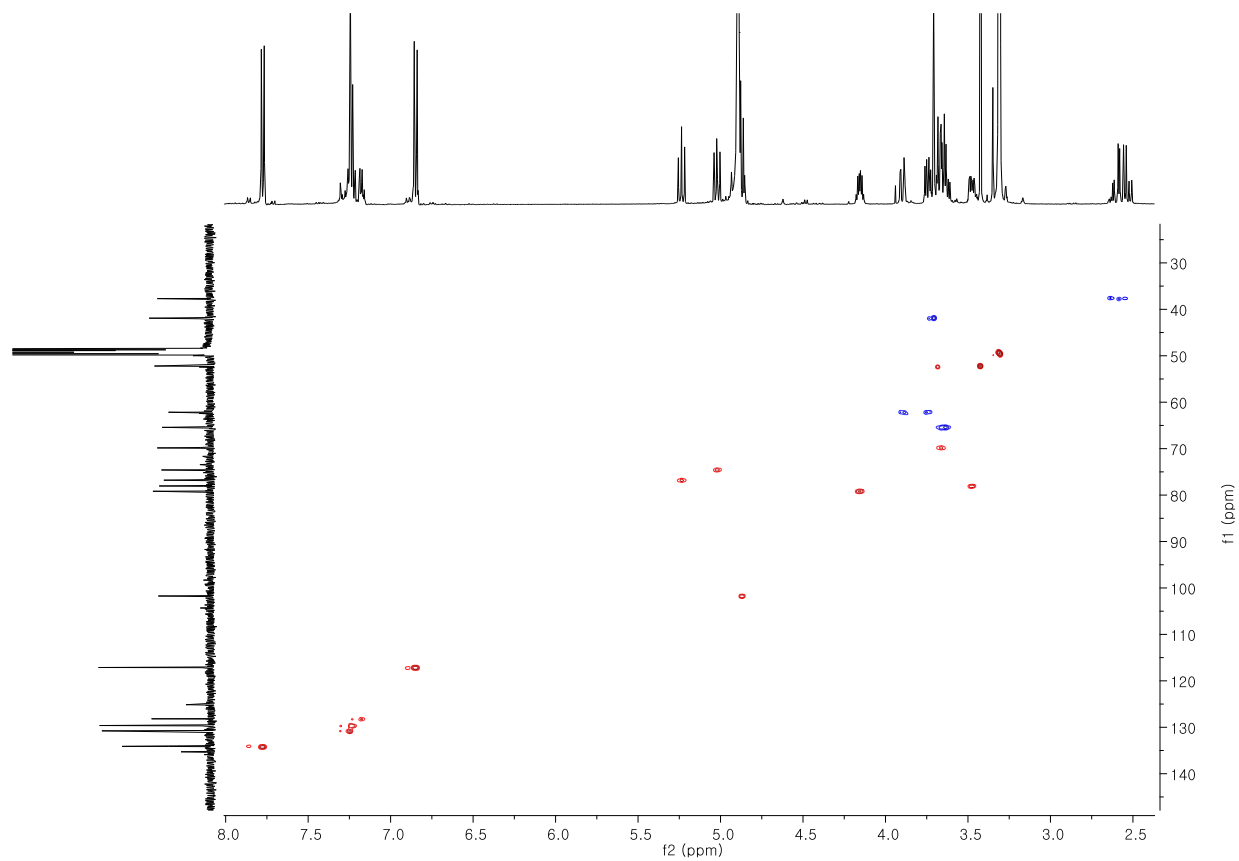


Fig. S21. HSQC spectrum of compound **4**

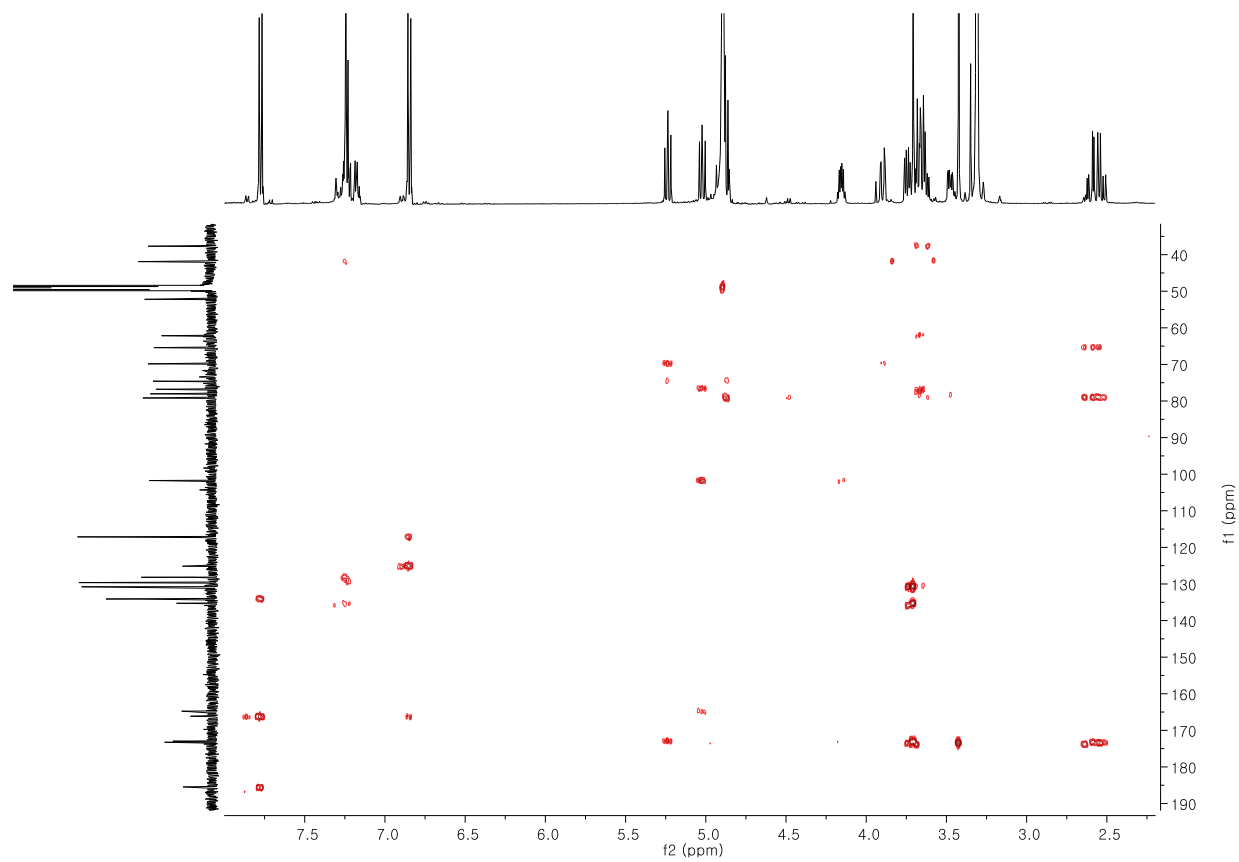


Fig. S22. HMBC spectrum of compound **4**

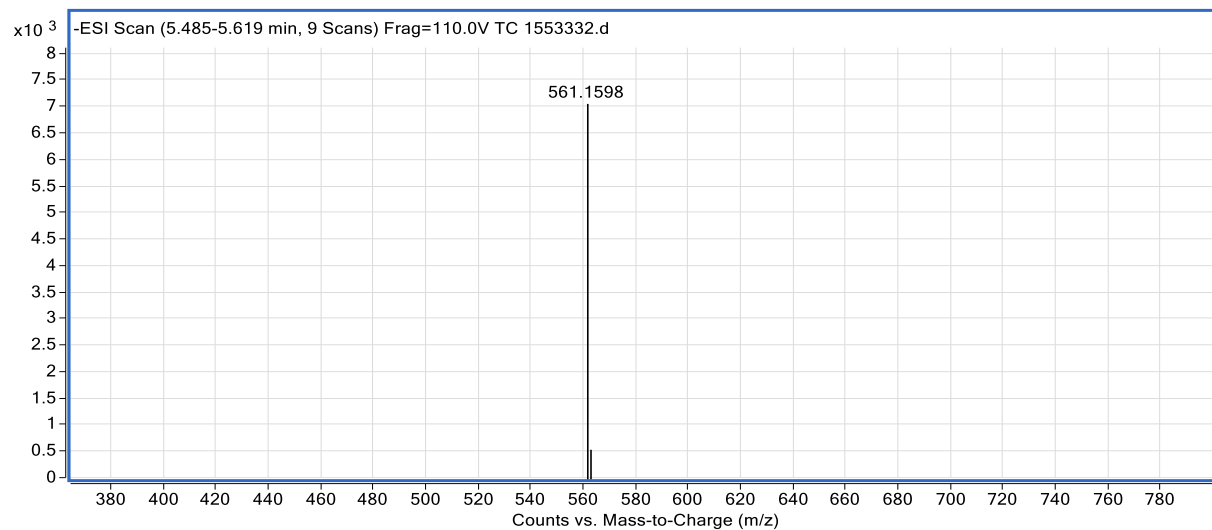


Fig. S23. MS spectrum of compound **4**

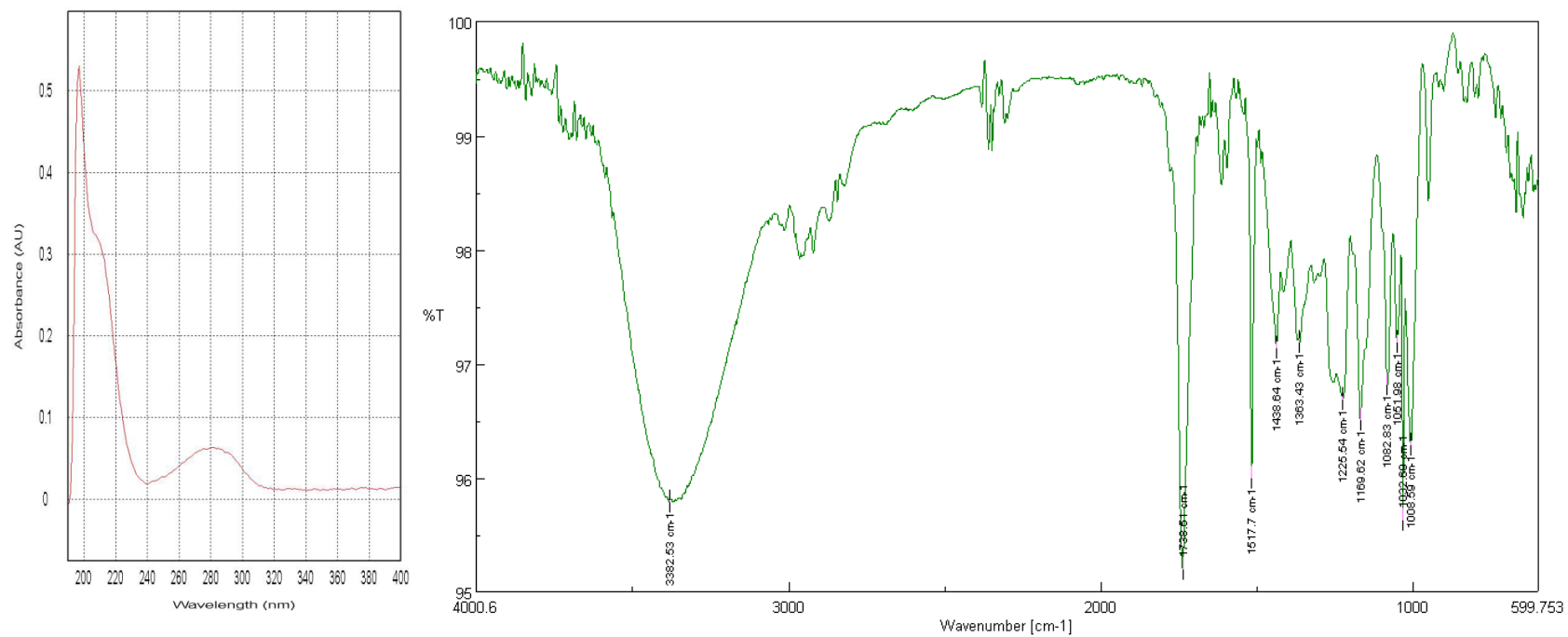


Fig. S24. UV, IR spectra of compound **4**

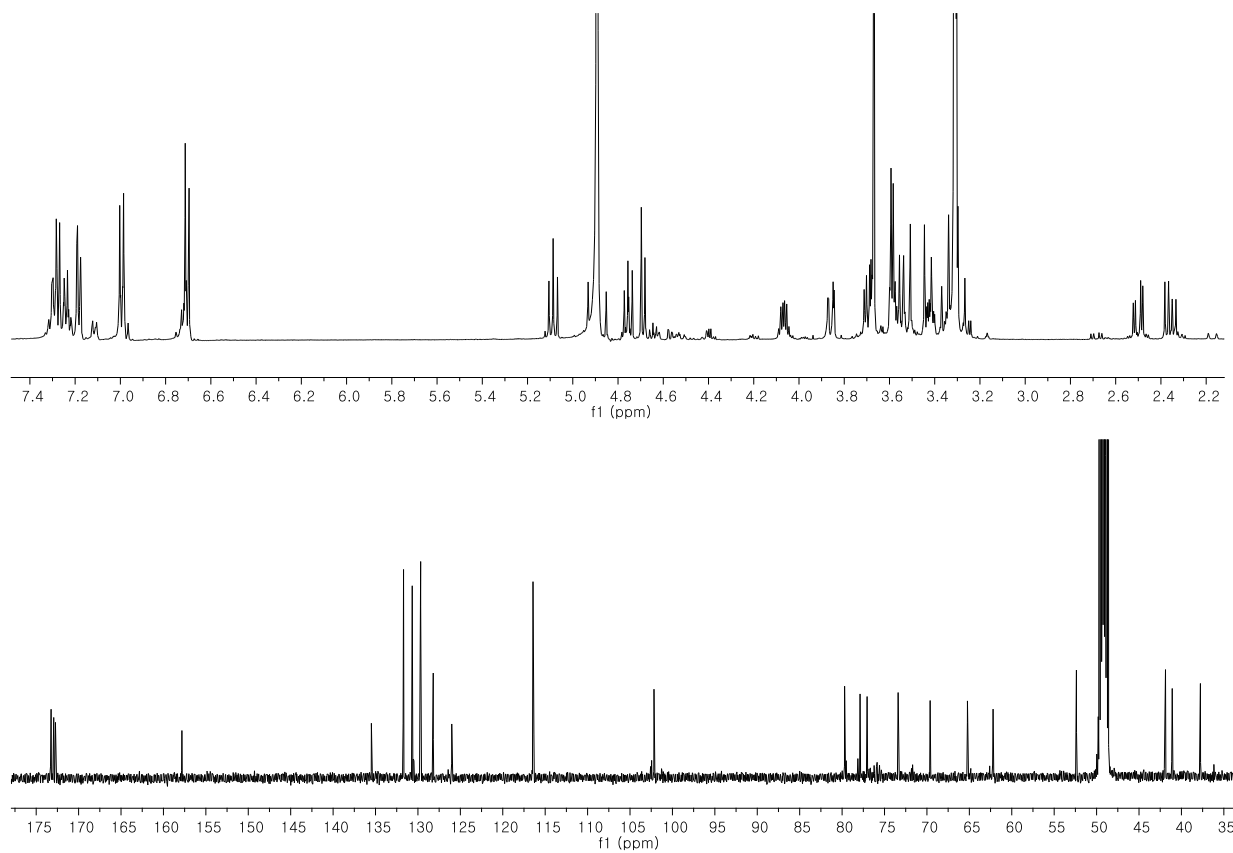


Fig. S25. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **5**

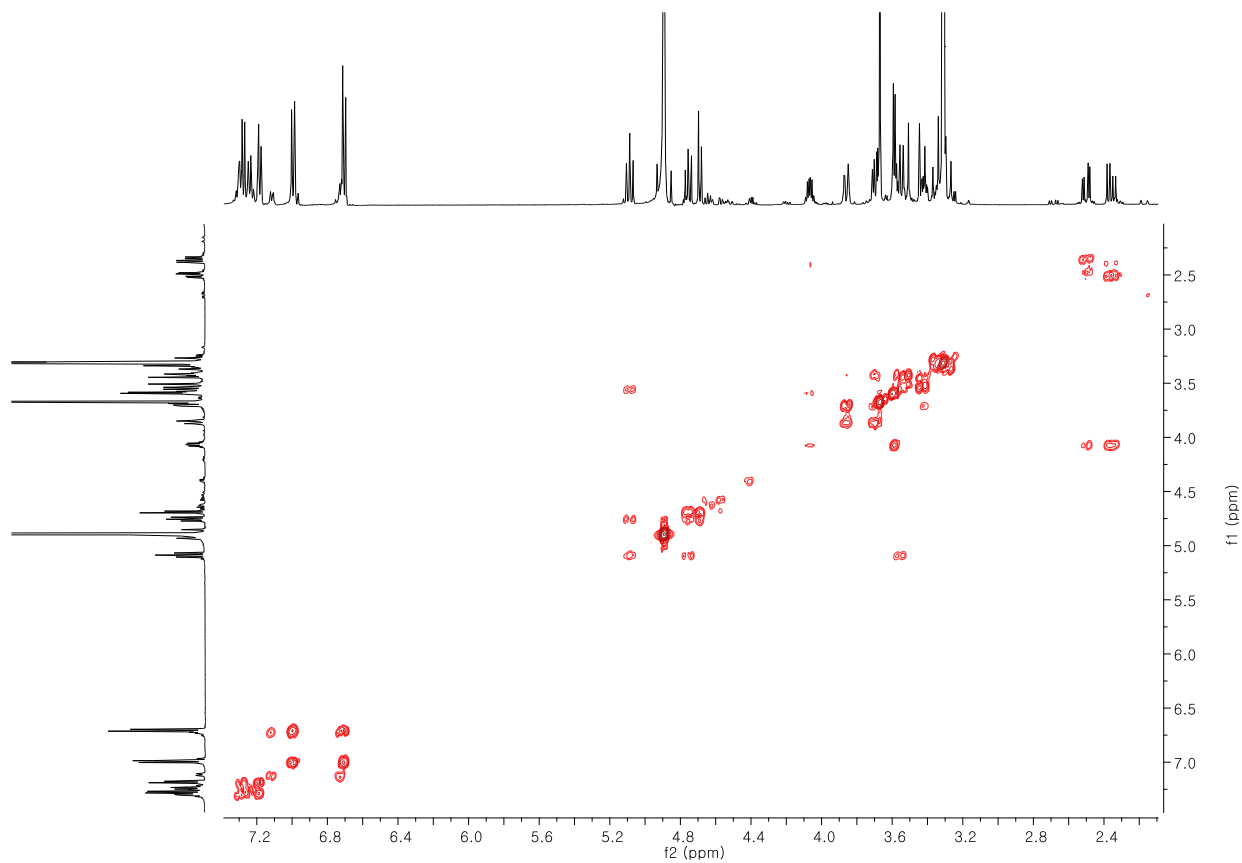


Fig. S26. ^1H - ^1H COSY spectrum of compound **5**

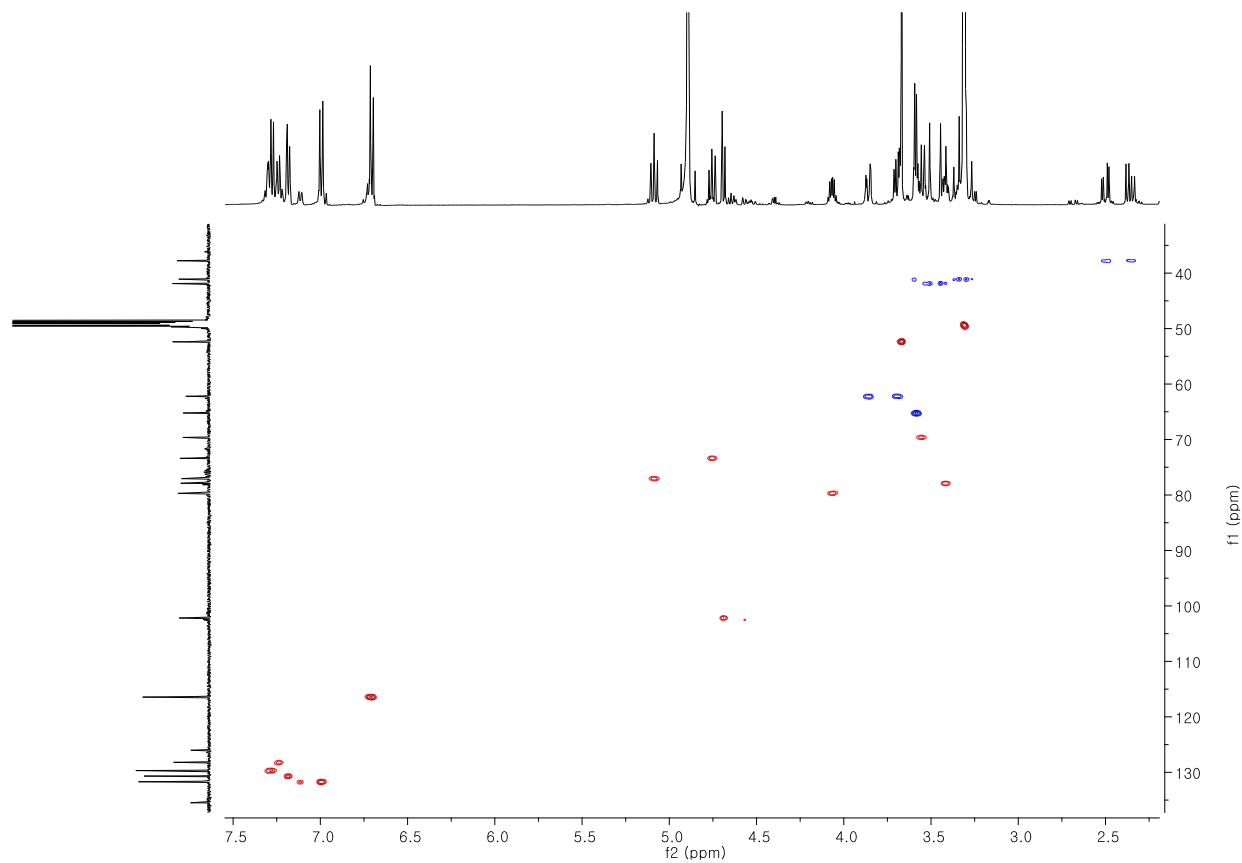


Fig. S27. HSQC spectrum of compound **5**

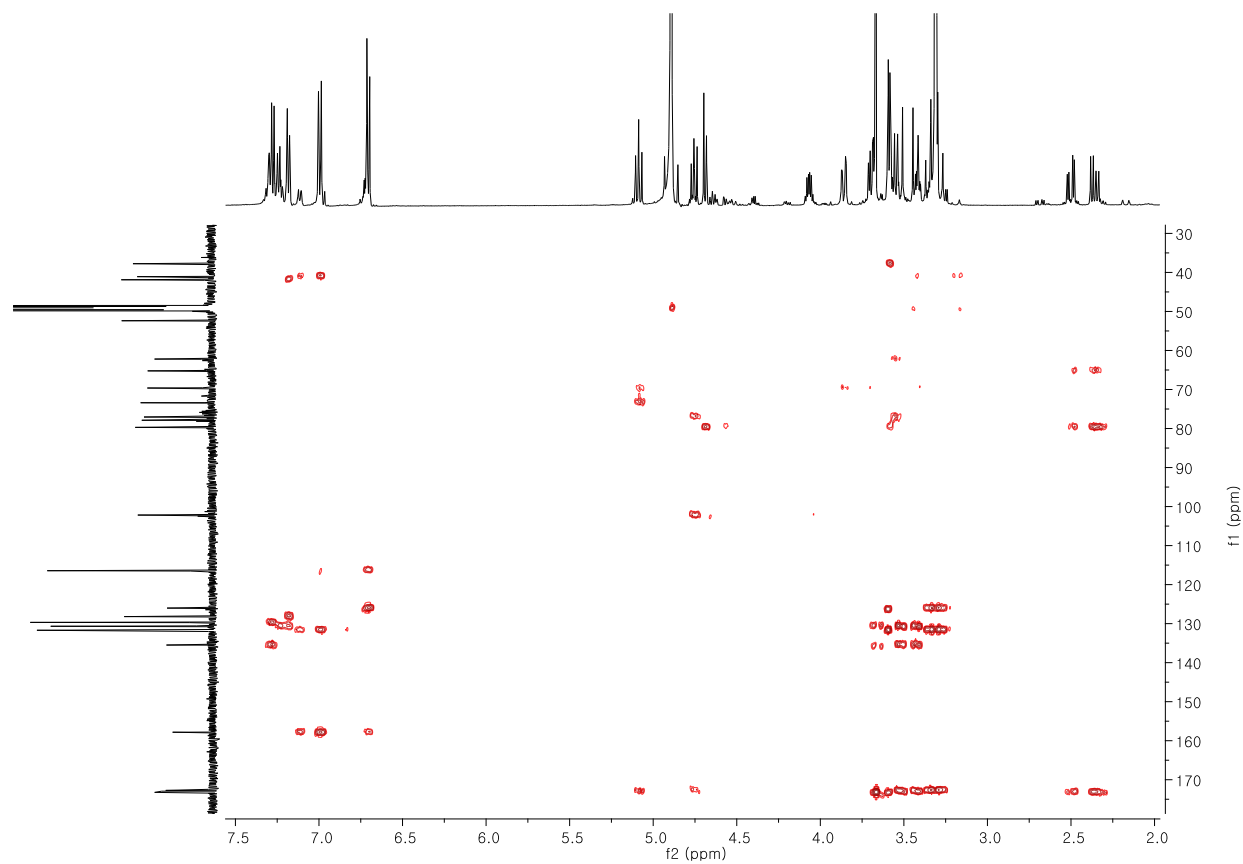


Fig. S28. HMBC spectrum of compound **5**

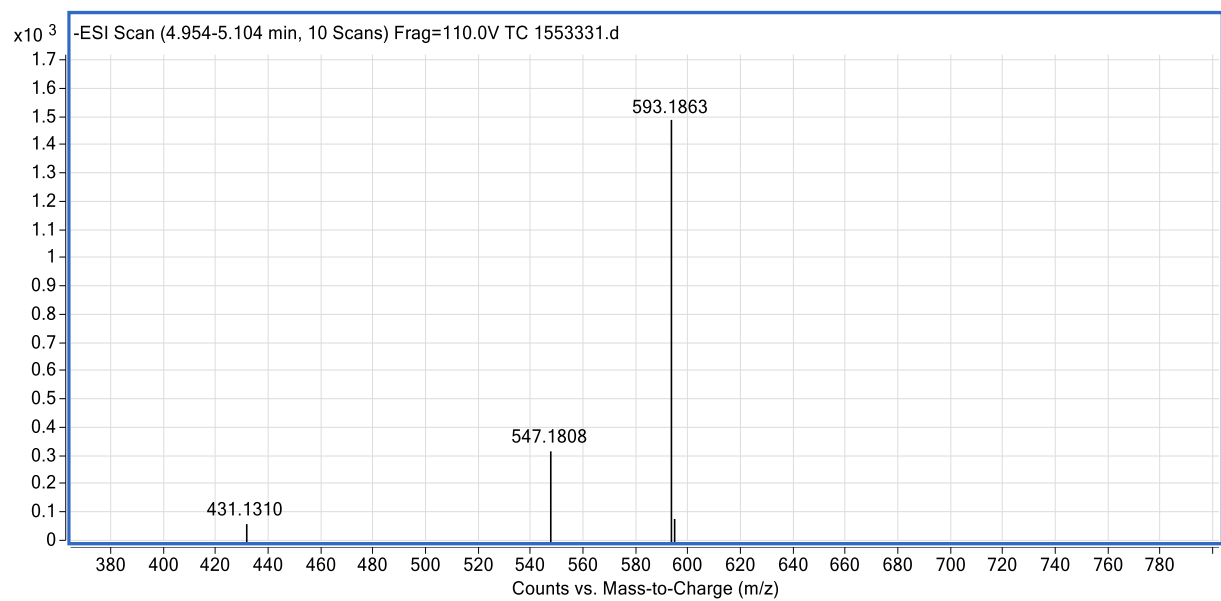


Fig. S29. MS spectrum of compound **5**

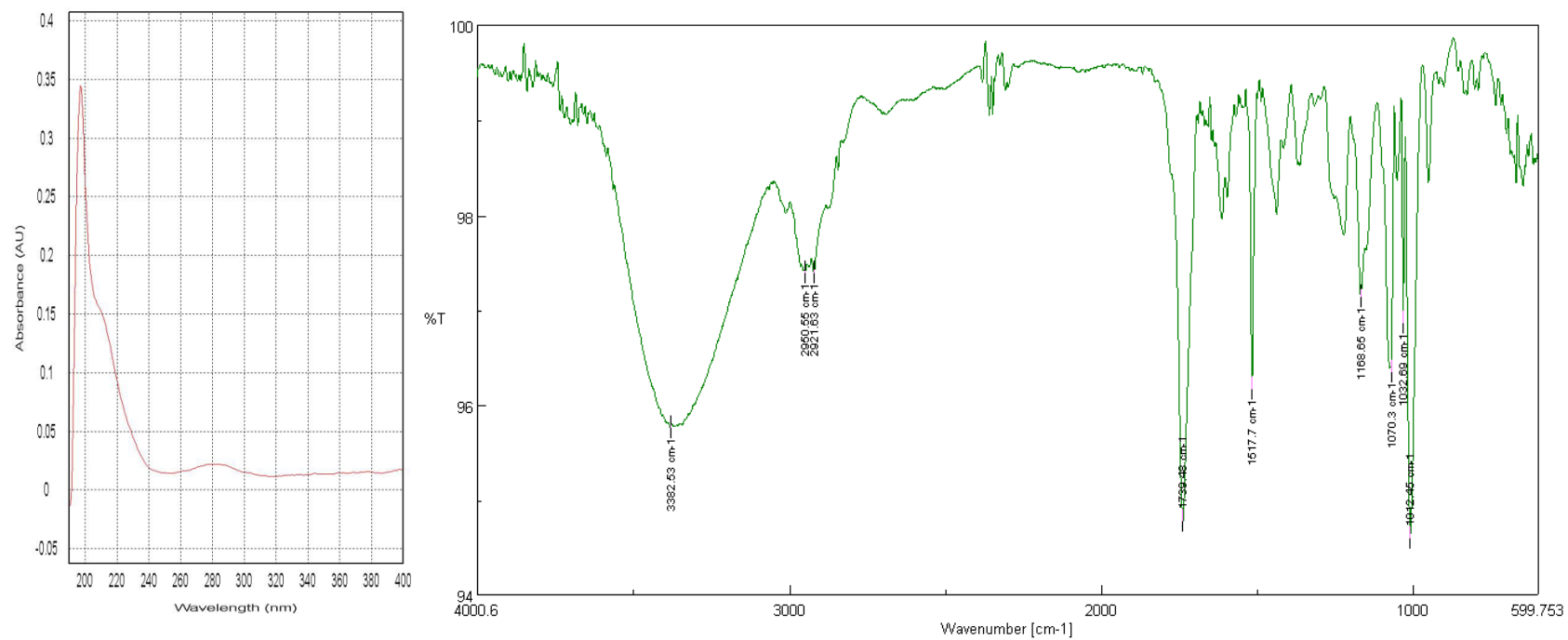


Fig. S30. UV, IR spectra of compound **5**

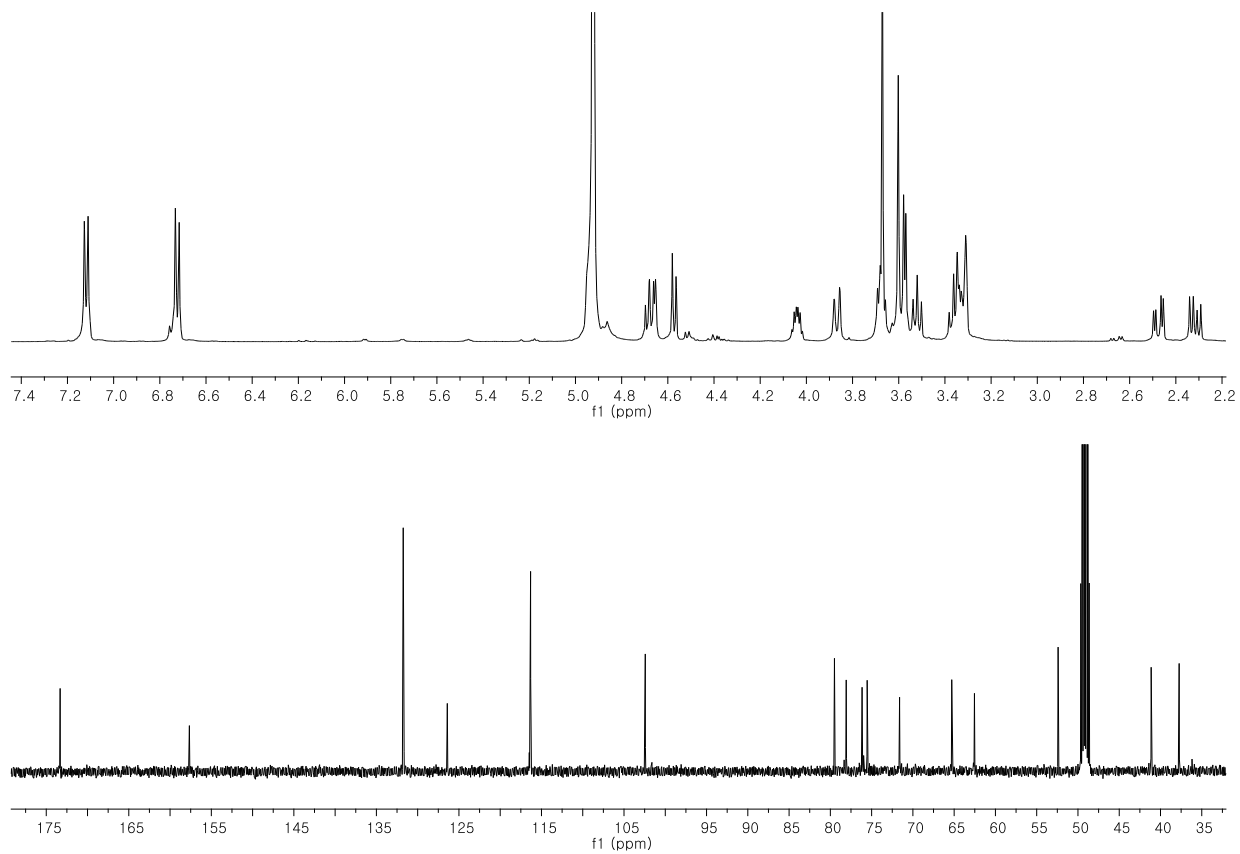
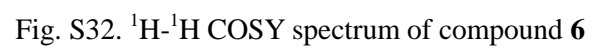


Fig. S31. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound 6



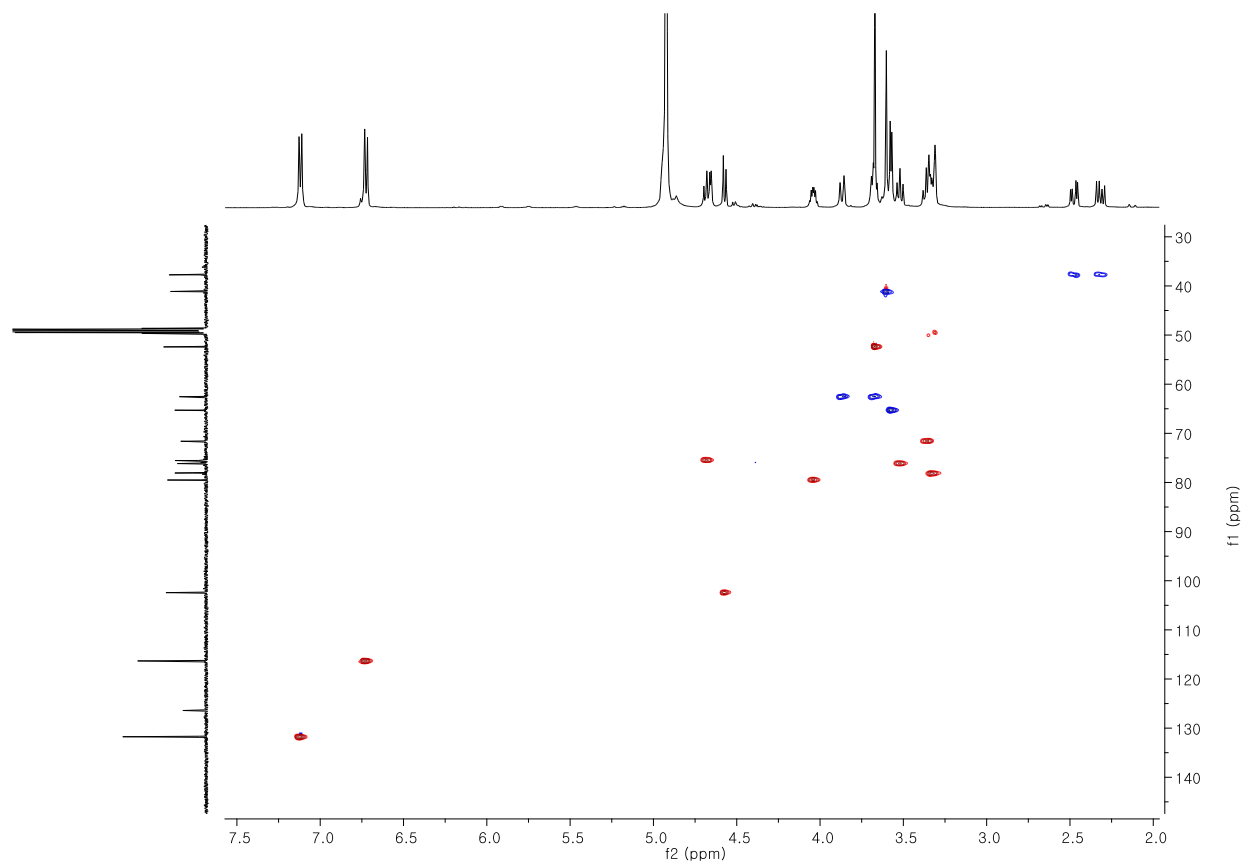


Fig. S33. HSQC spectrum of compound **6**

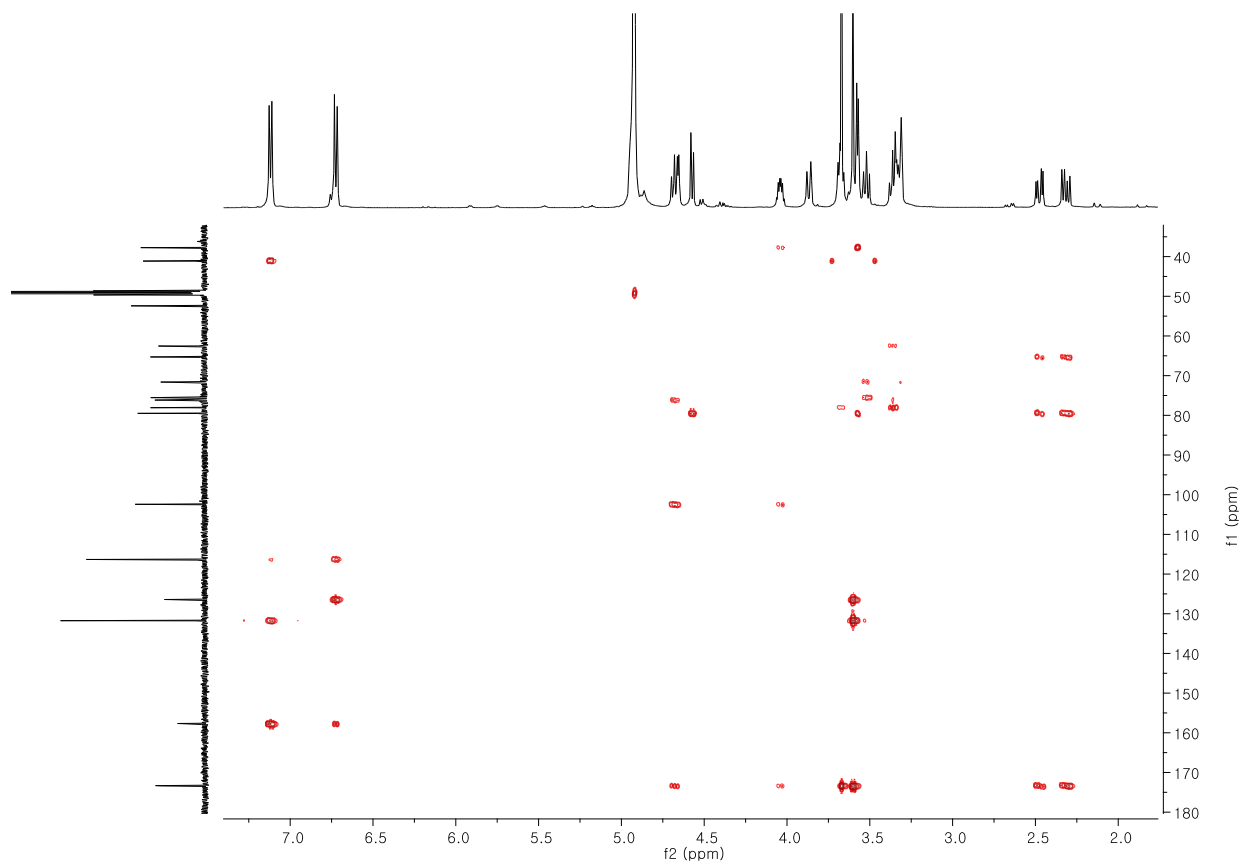


Fig. S34. HMBC spectrum of compound **6**

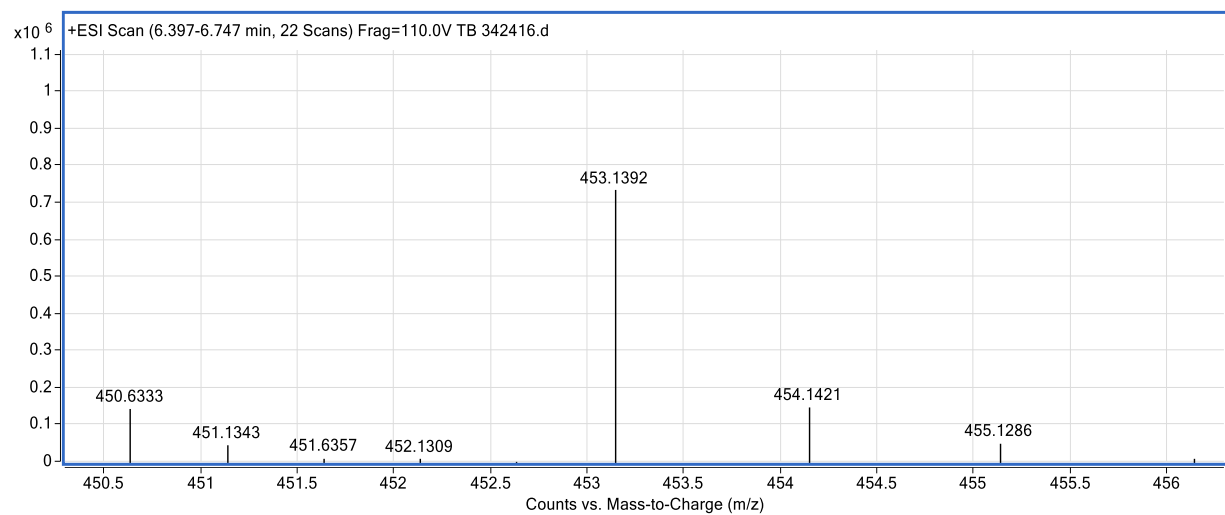


Fig. S35. MS spectrum of compound **6**

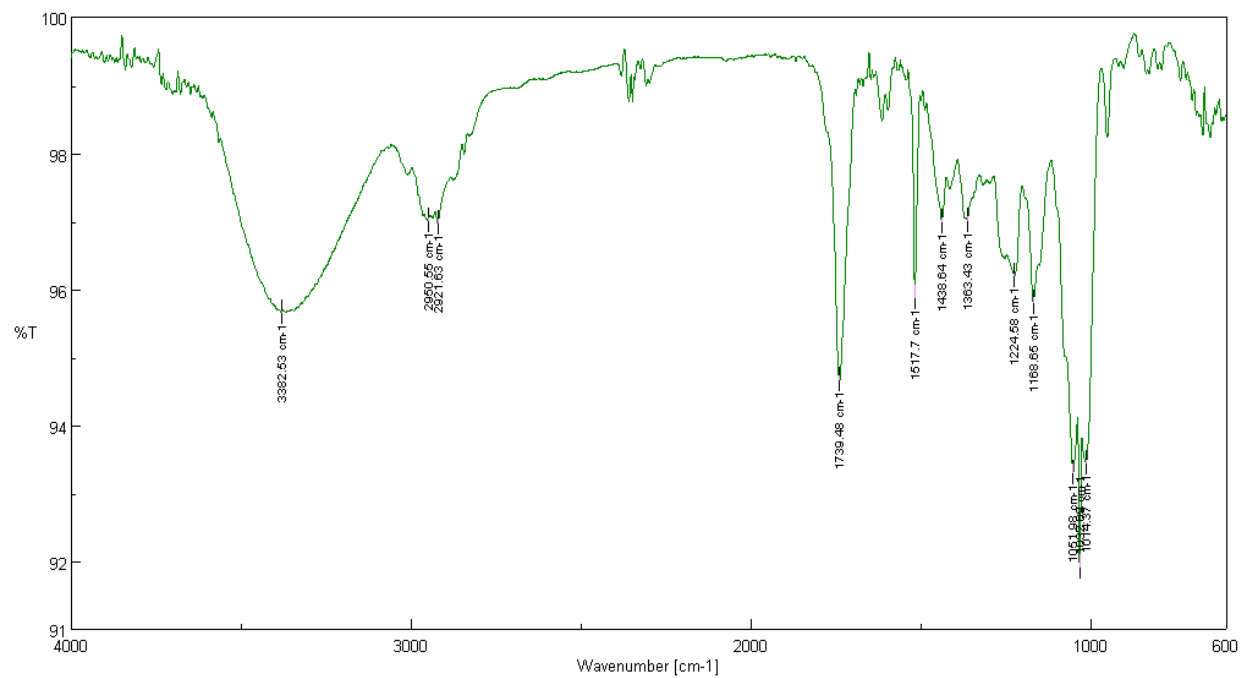
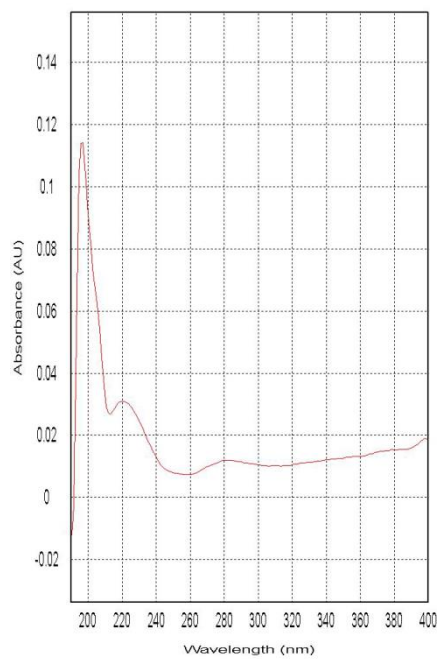


Fig. S36. UV, IR spectra of compound **6**

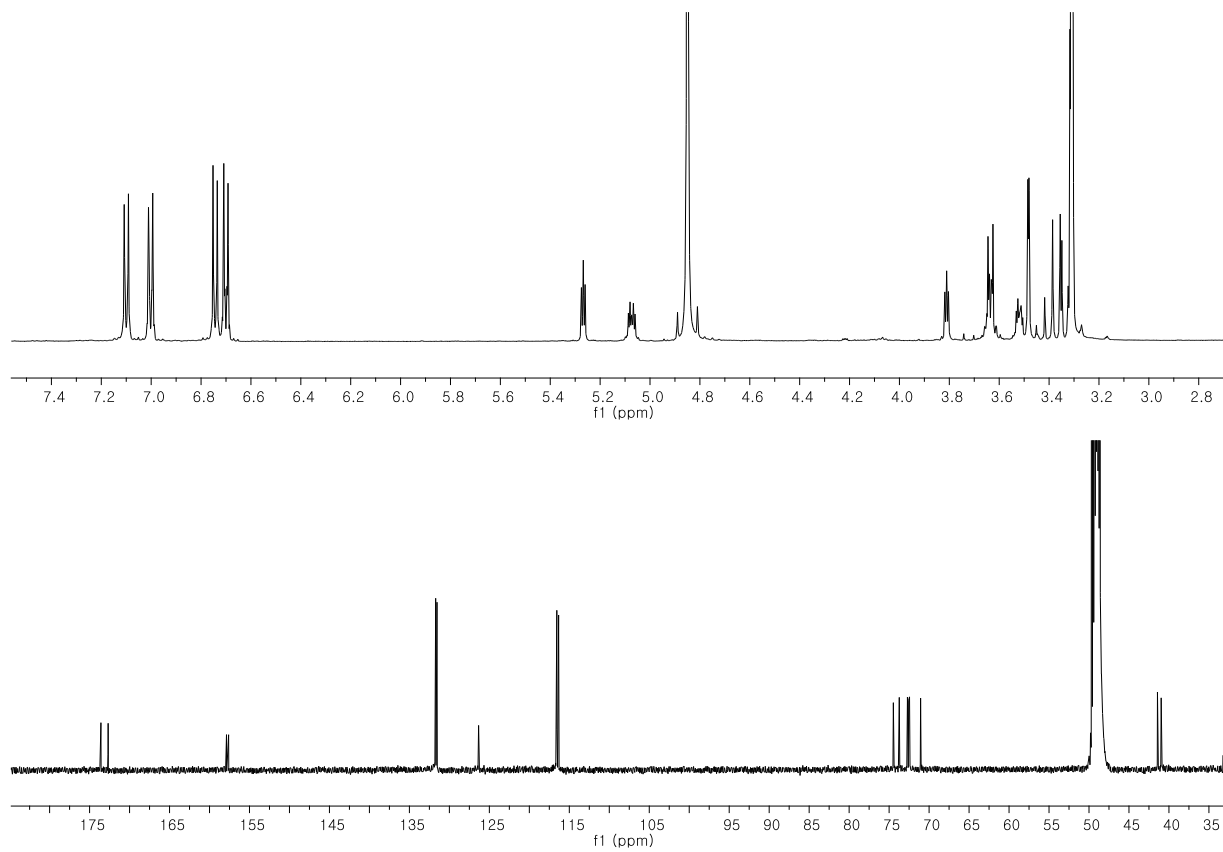


Fig. S37. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **7**

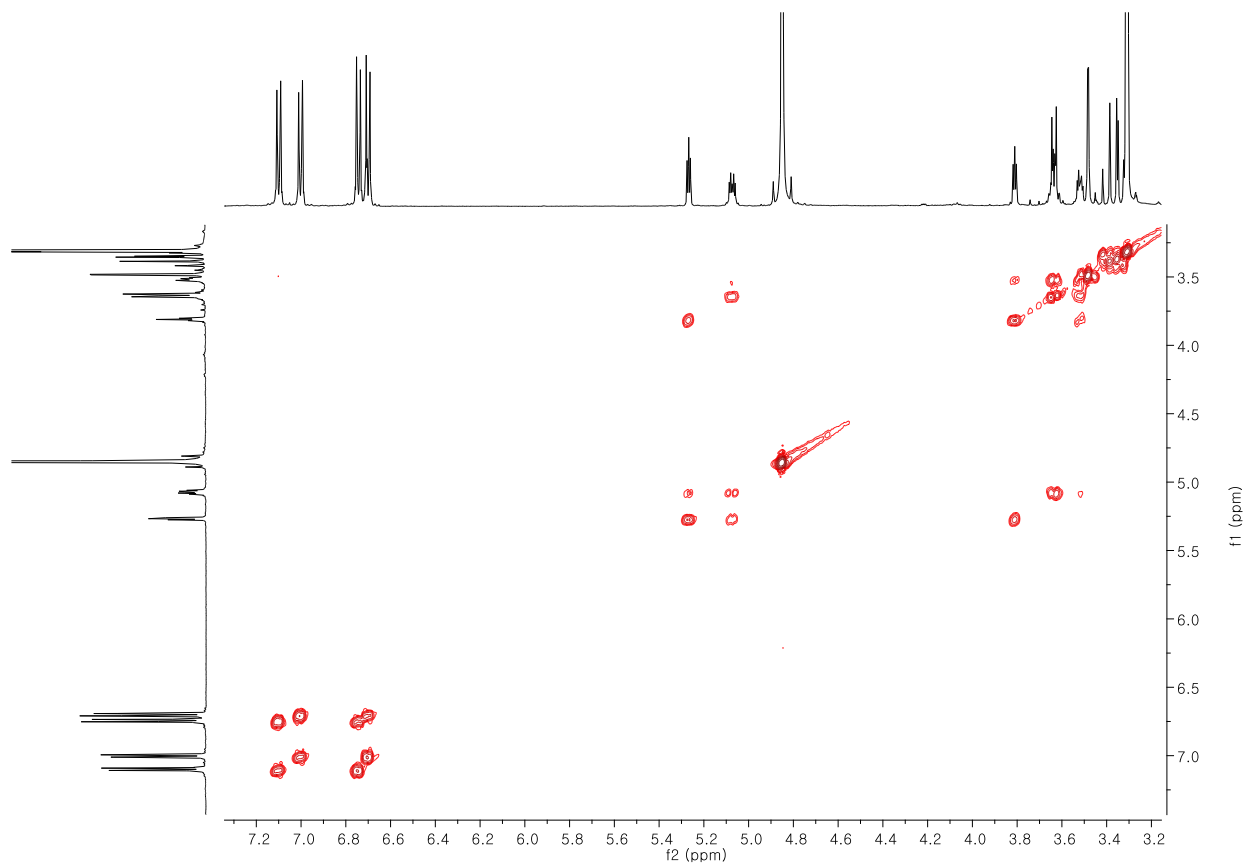


Fig. S38. ^1H - ^1H COSY spectrum of compound **7**

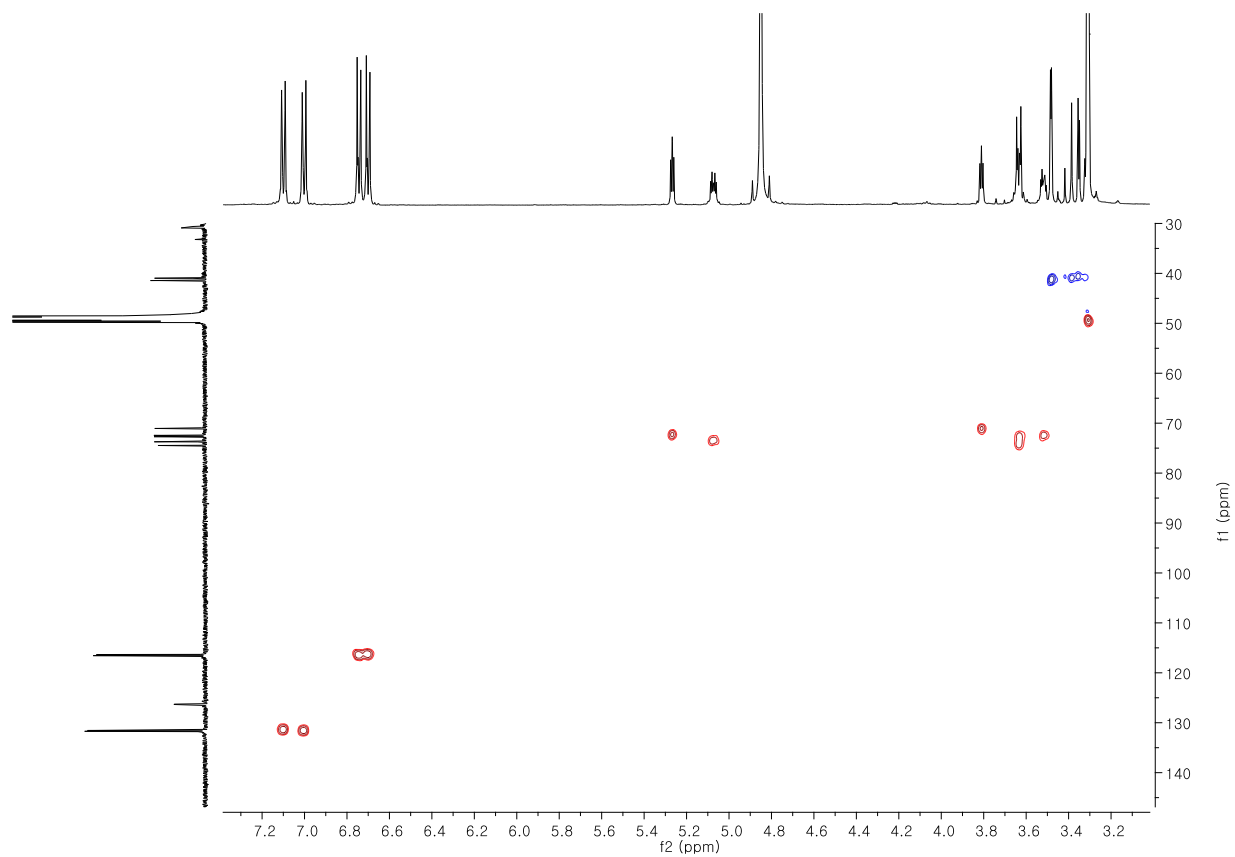


Fig. S39. HSQC spectrum of compound **7**

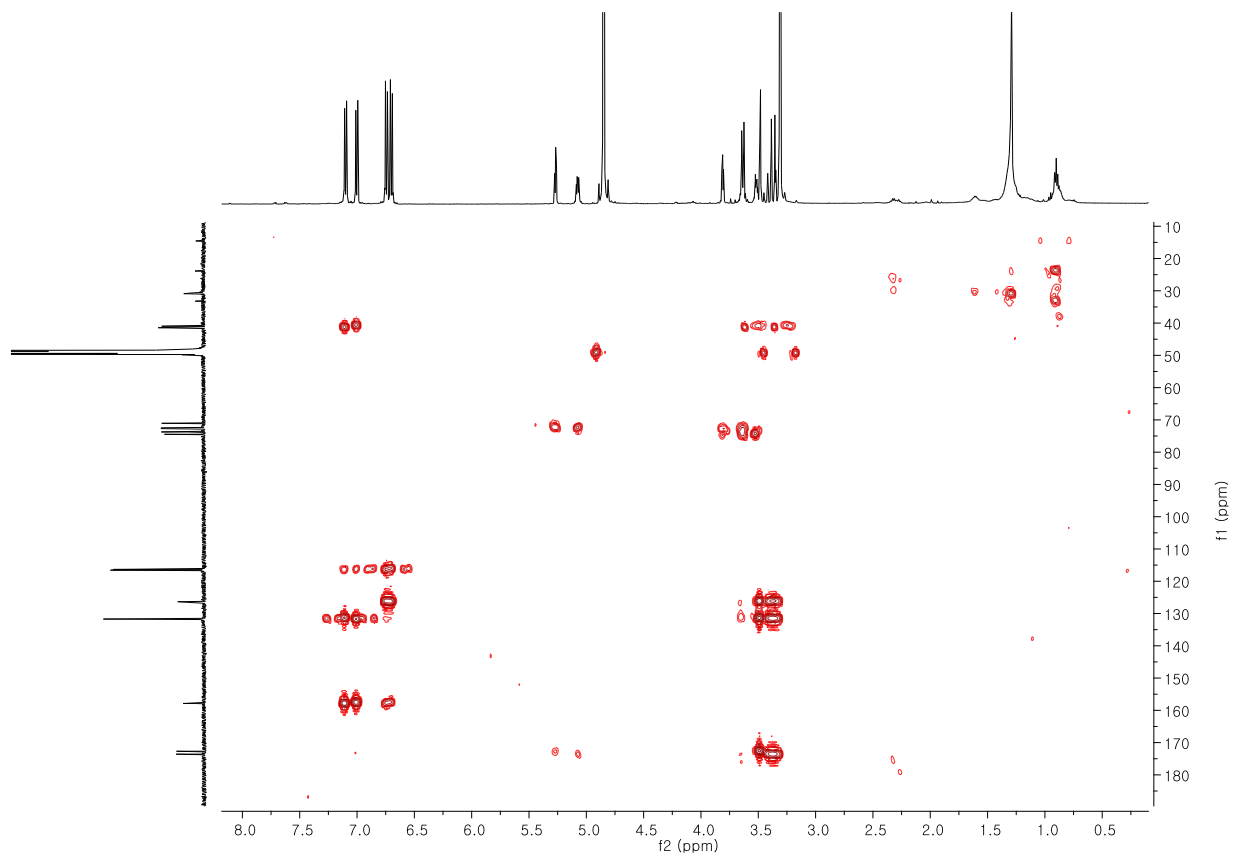


Fig. S40. HMBC spectrum of compound **7**

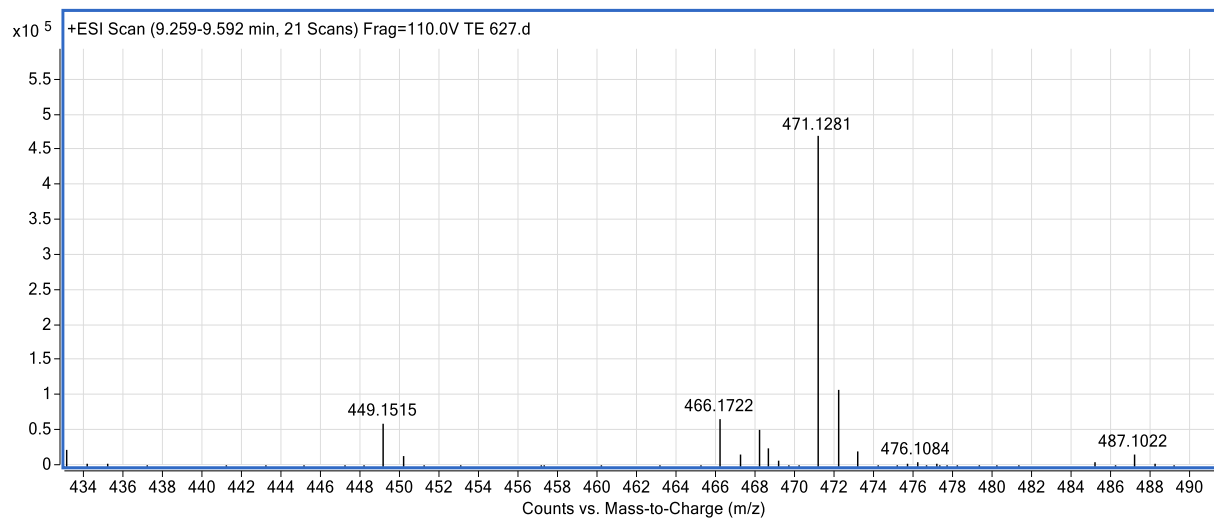


Fig. S41. MS spectrum of compound **7**

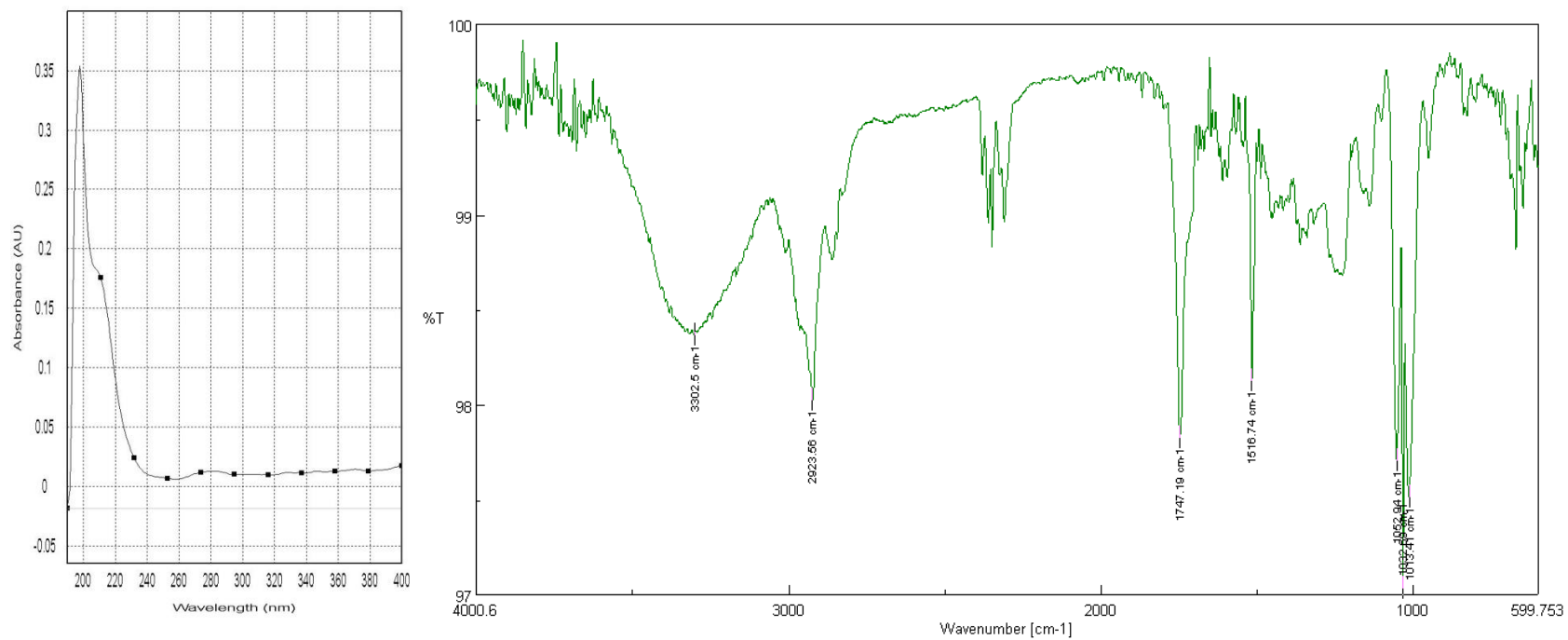


Fig. S42. UV, IR spectra of compound **7**

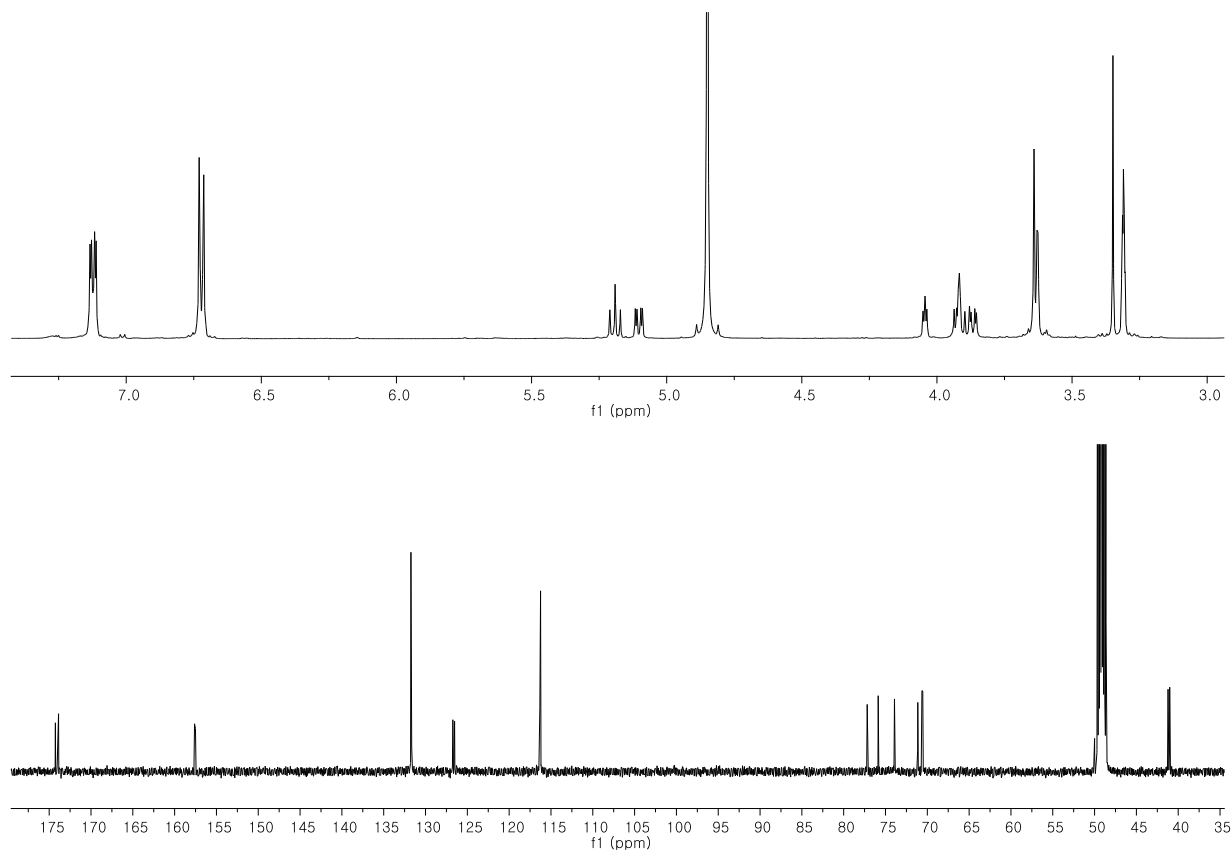


Fig. S43. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **8**

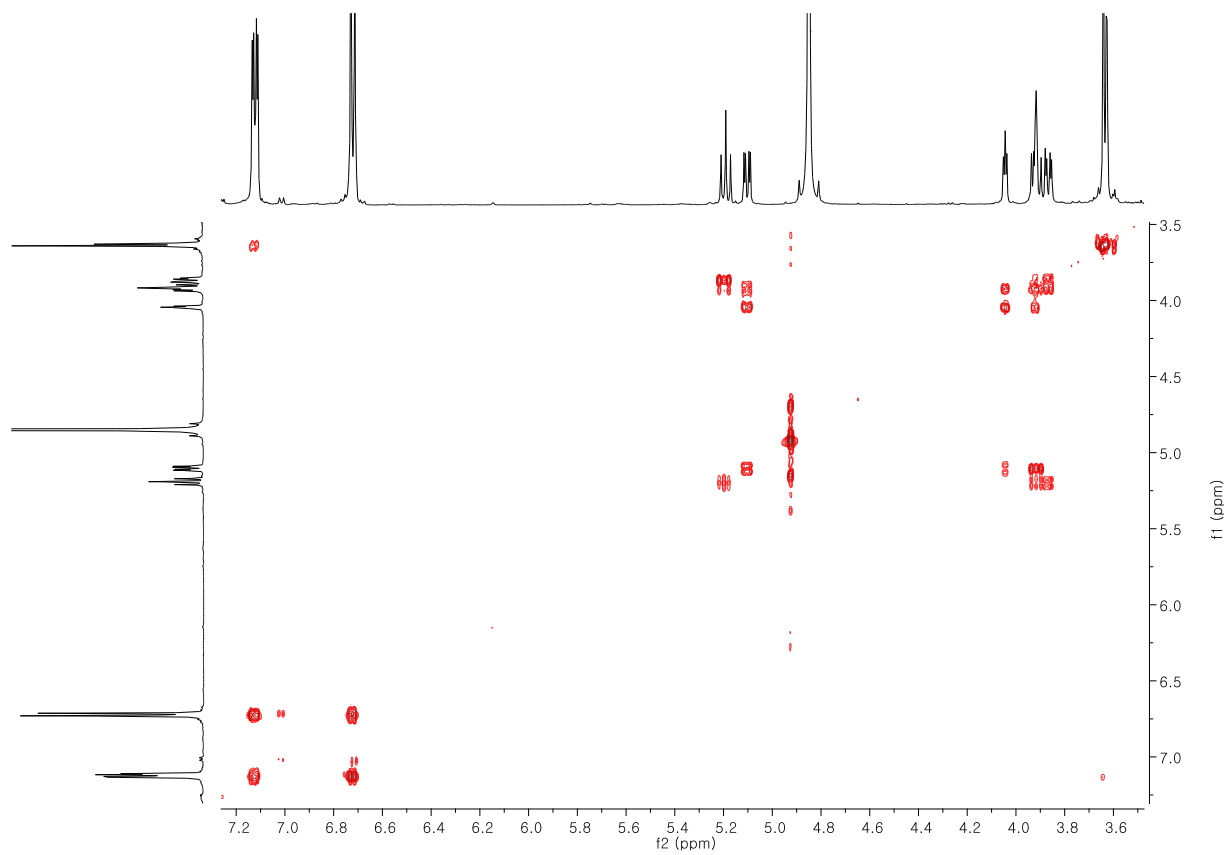


Fig. S44. ^1H - ^1H COSY spectrum of compound **8**

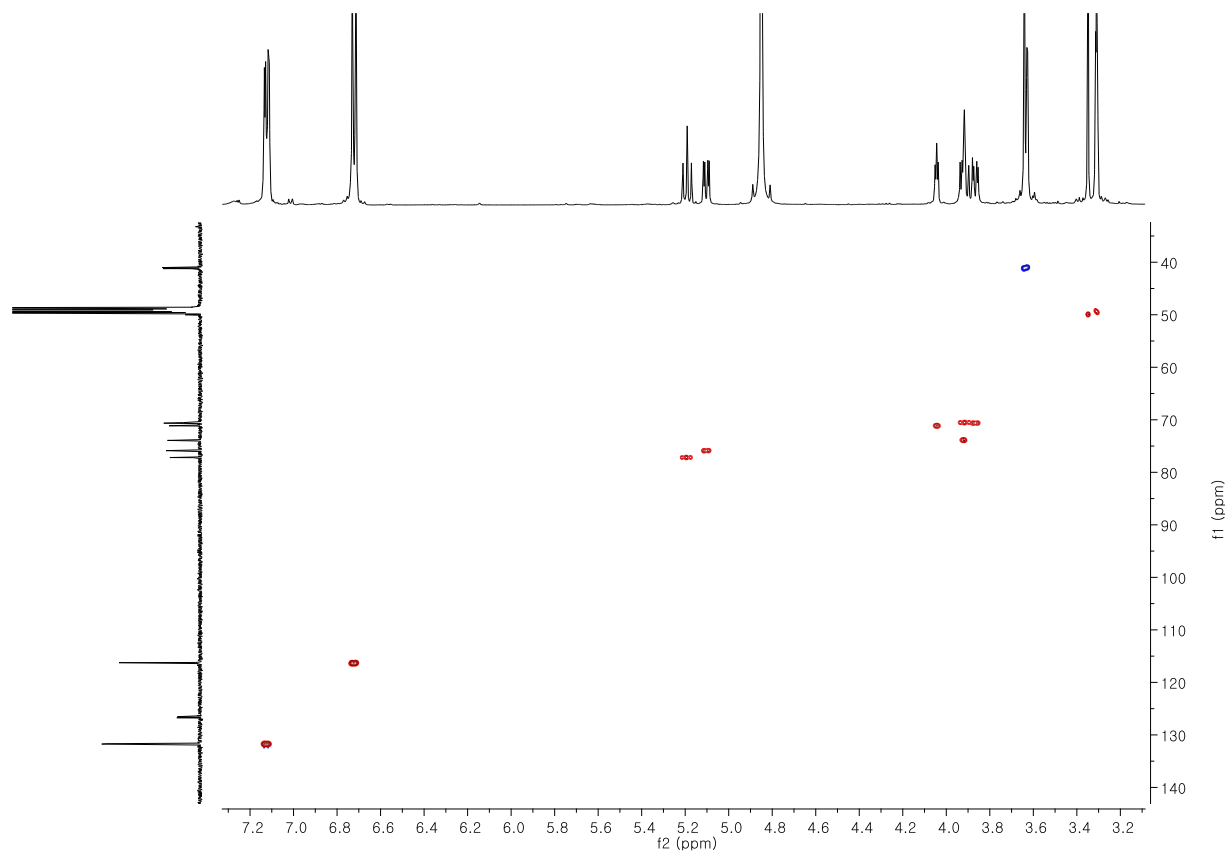


Fig. S45. HSQC spectrum of compound **8**

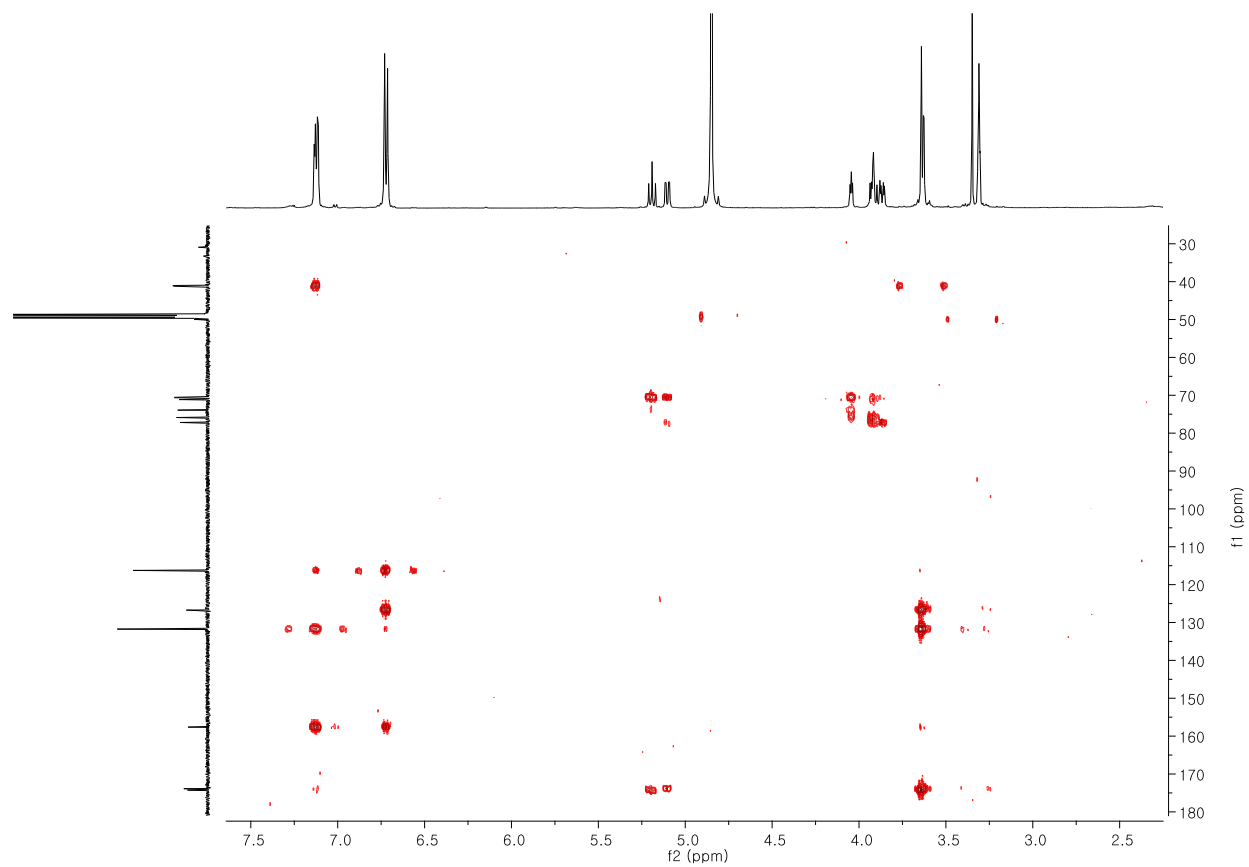


Fig. S46. HMBC spectrum of compound **8**

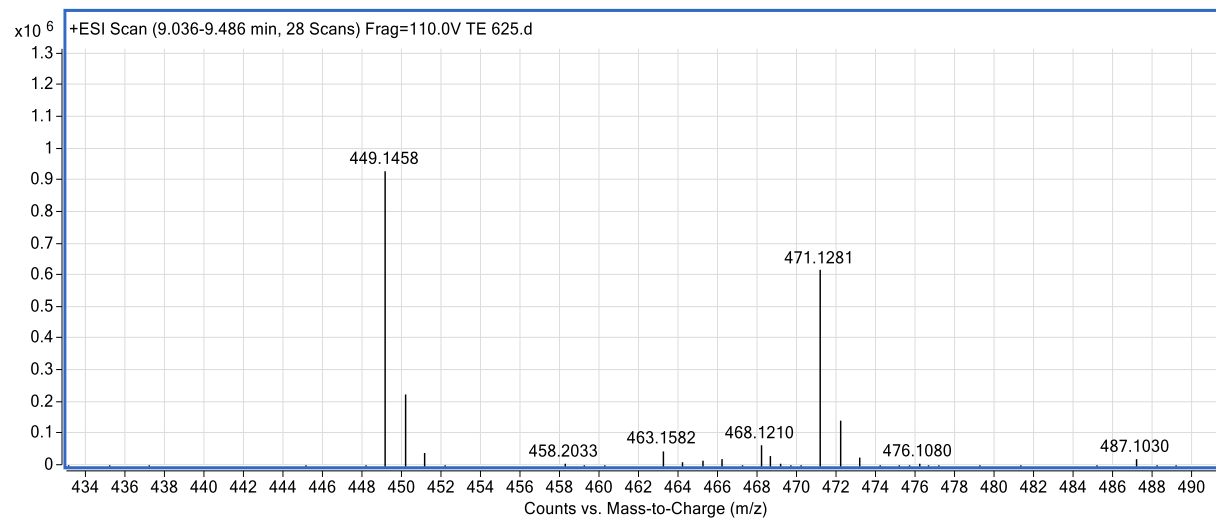


Fig. S47. MS spectrum of compound **8**

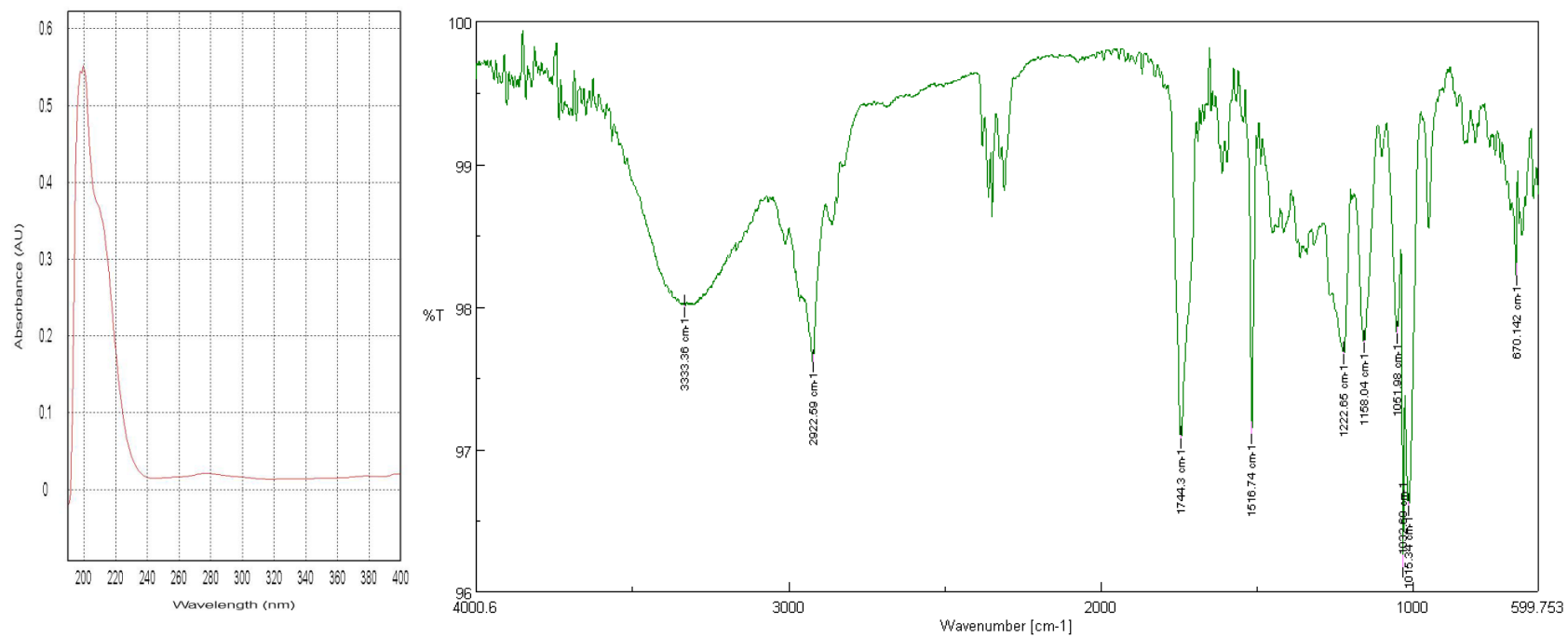


Fig. S48. UV, IR spectra of compound **8**

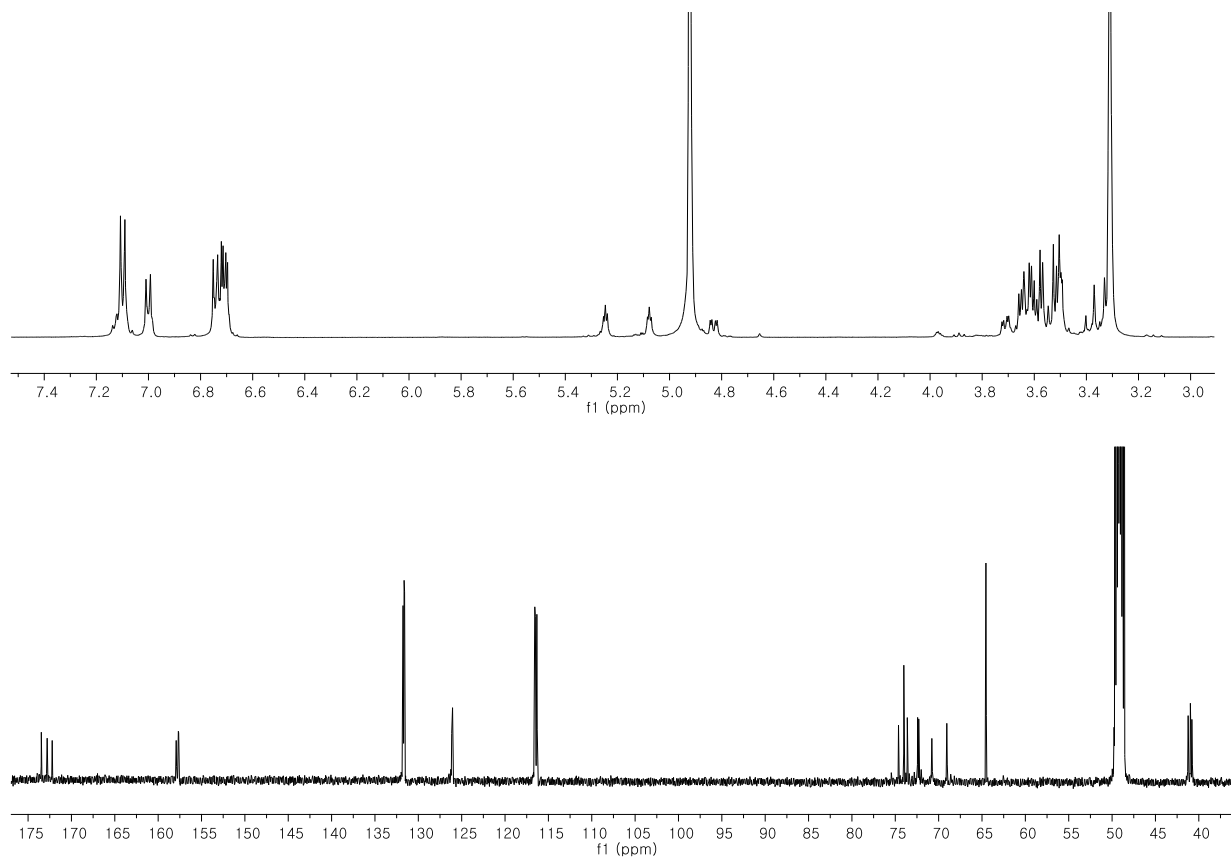


Fig. S49. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **9**

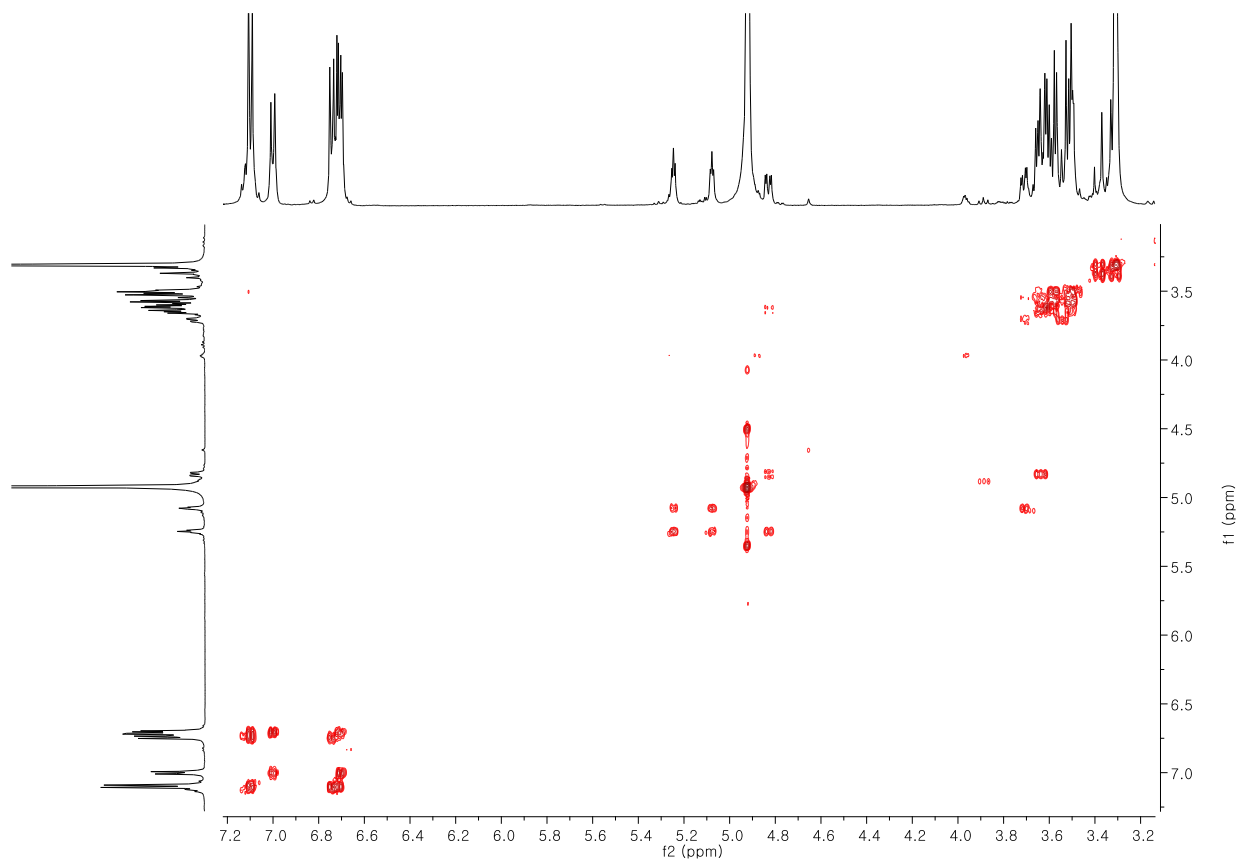


Fig. S50. ^1H - ^1H COSY spectrum of compound **9**

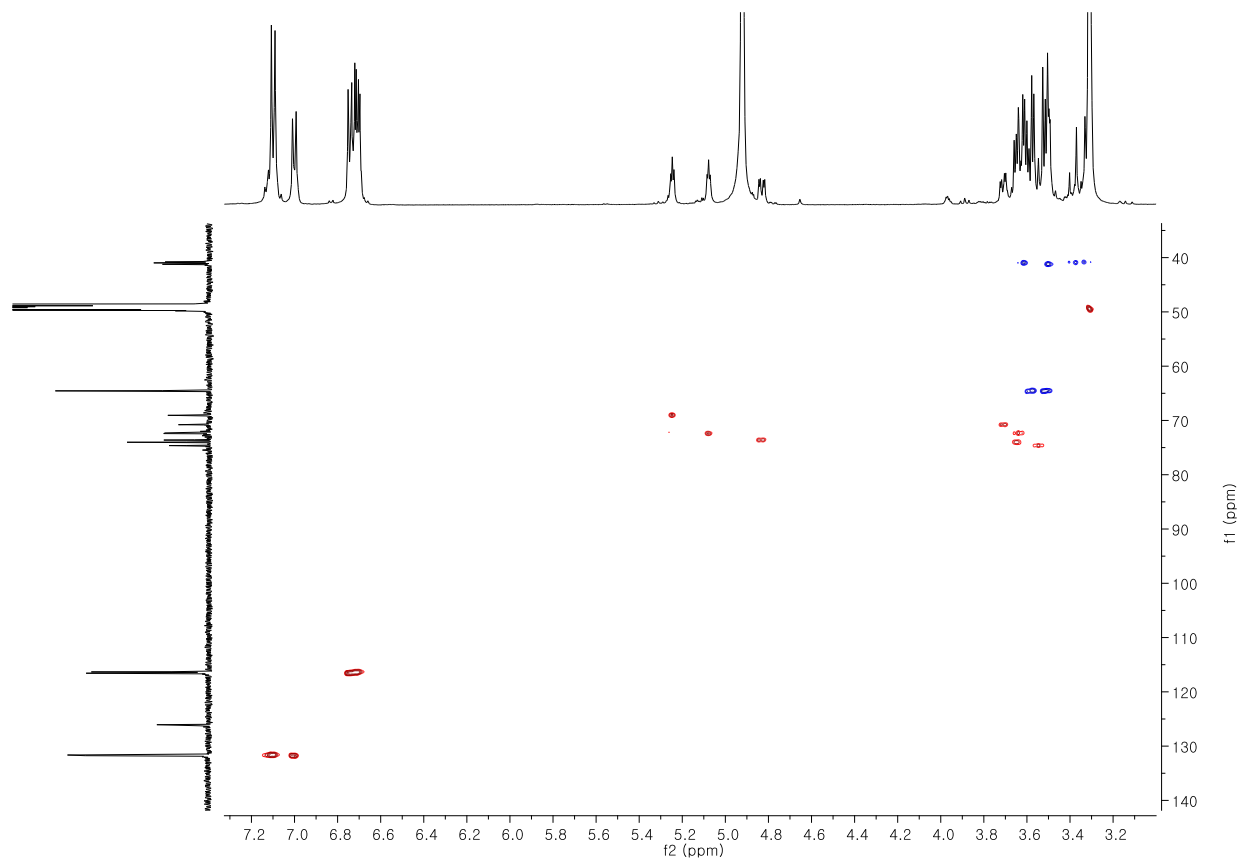


Fig. S51. HSQC spectrum of compound **9**

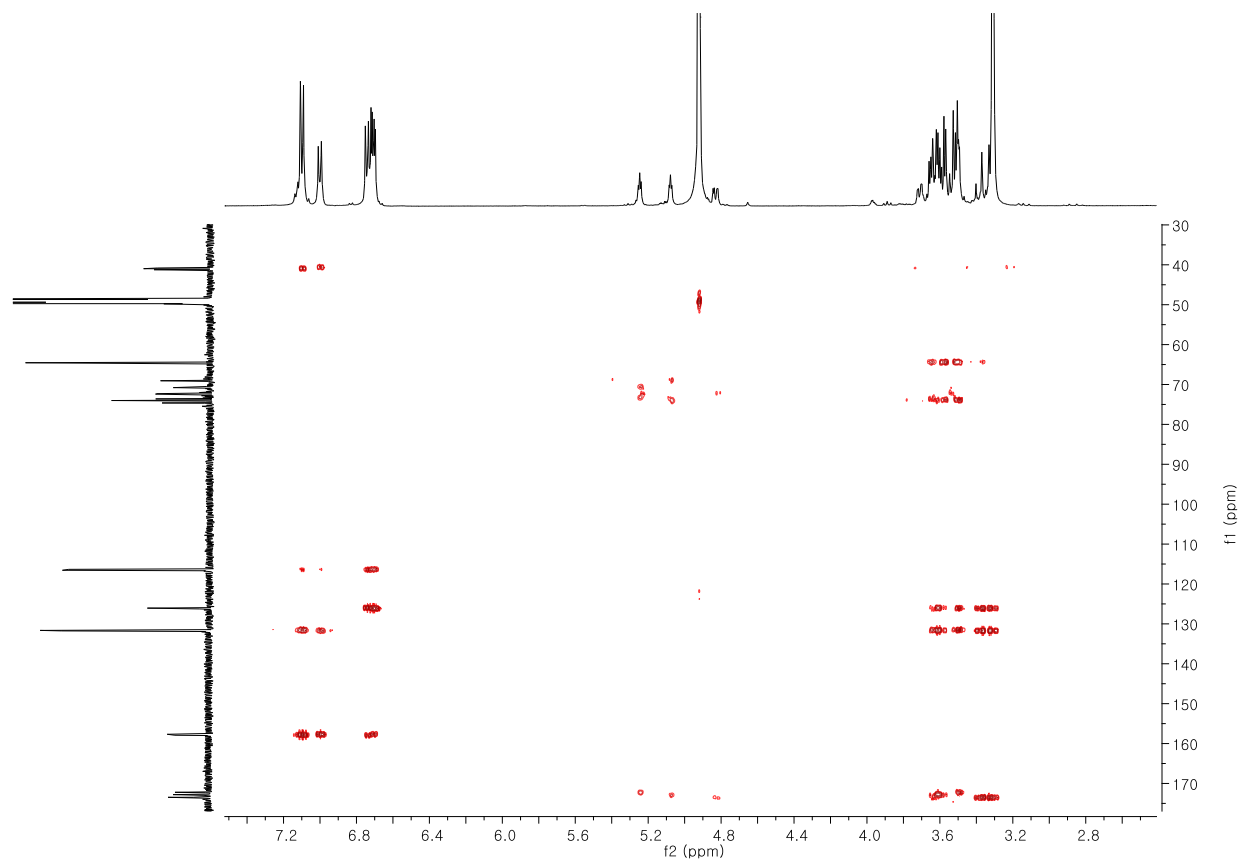


Fig. S52. HMBC spectrum of compound **9**

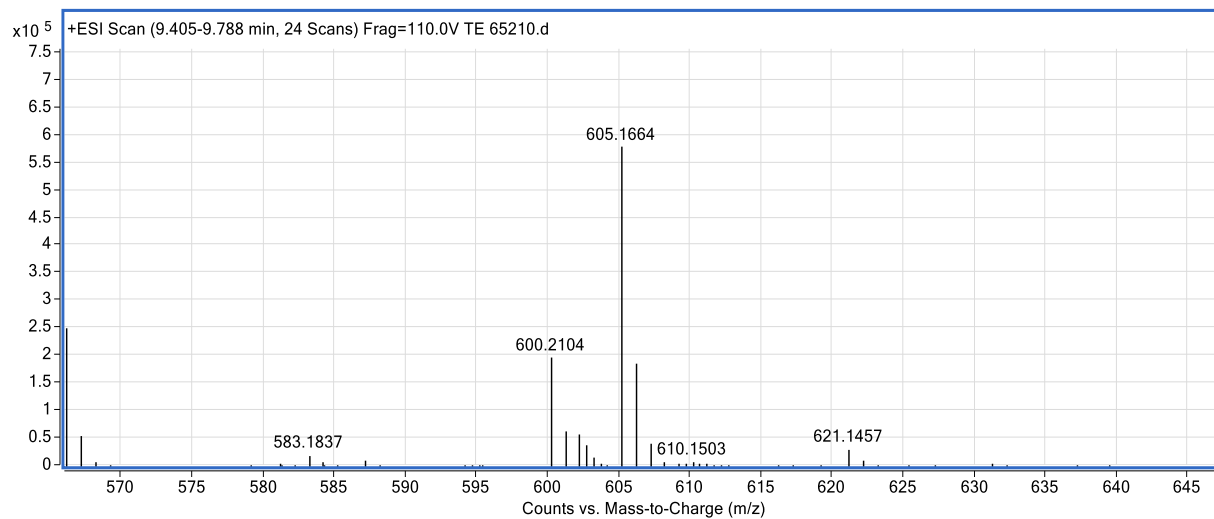


Fig. S53. MS spectrum of compound **9**

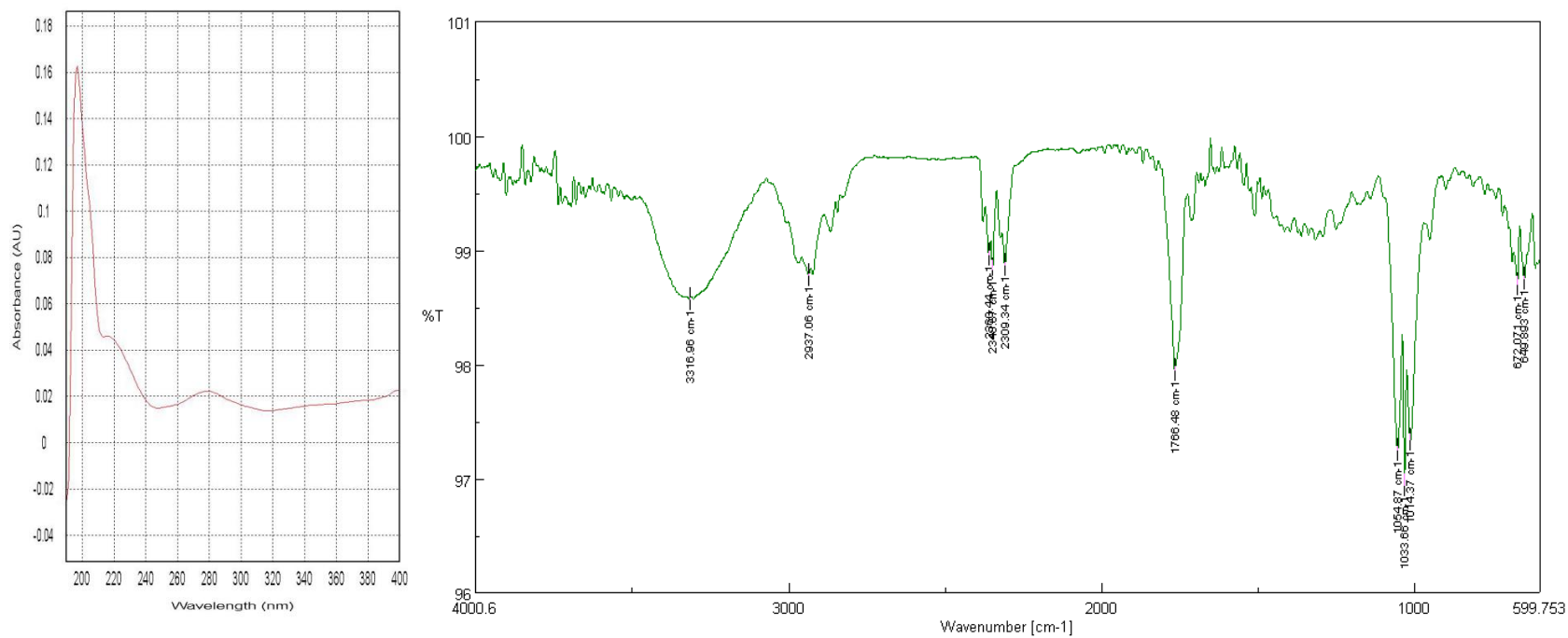


Fig. S54. UV, IR spectra of compound **9**

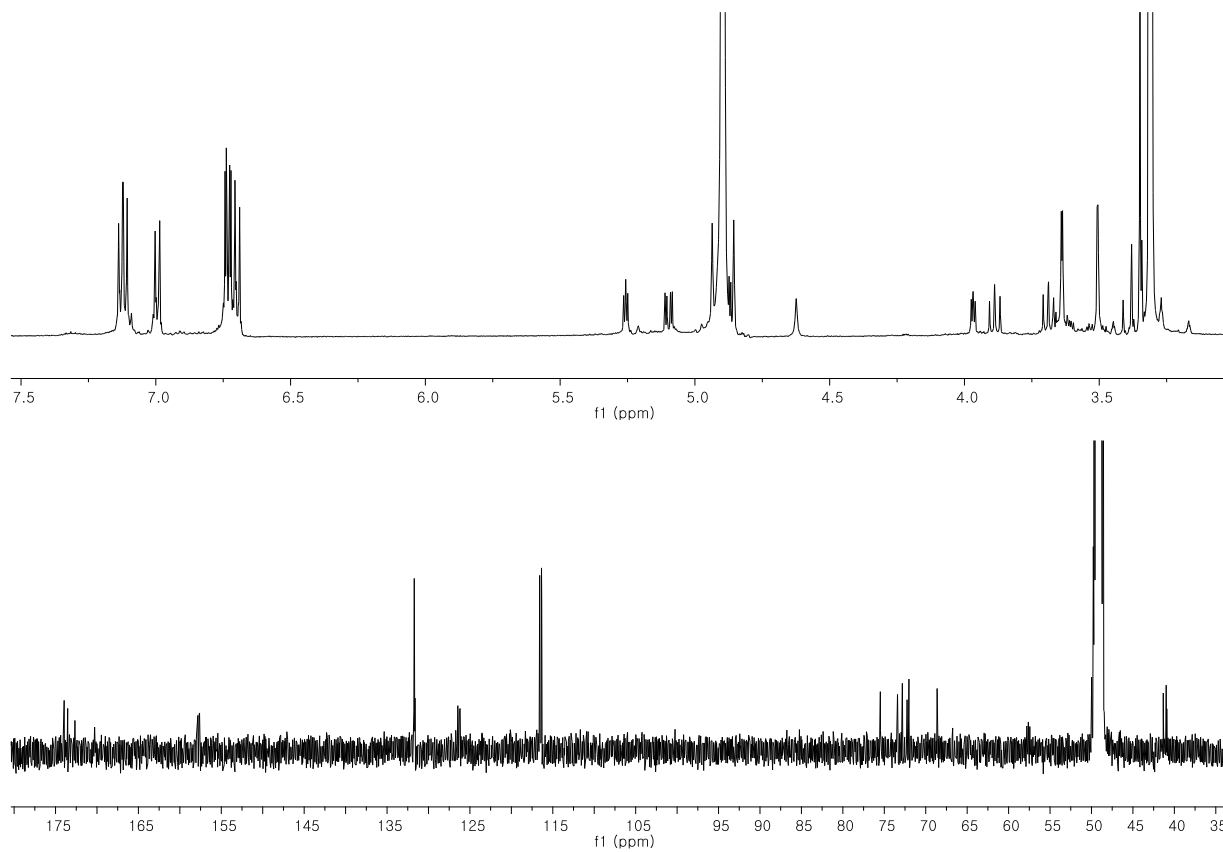


Fig. S55. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **10**

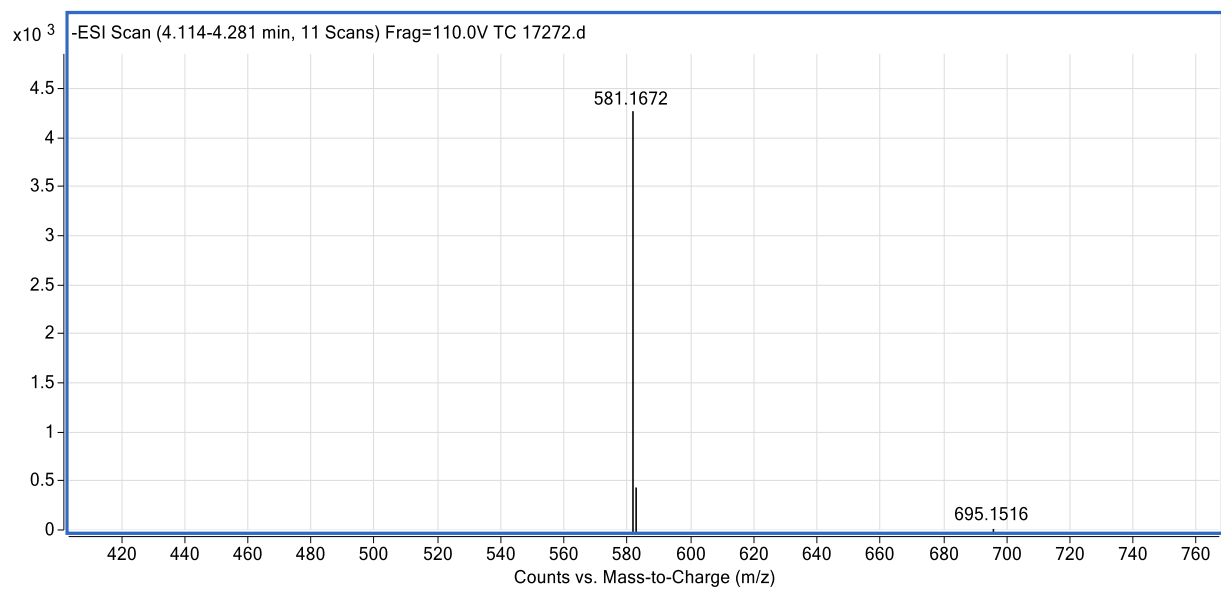


Fig. S56. MS spectrum of compound **10**

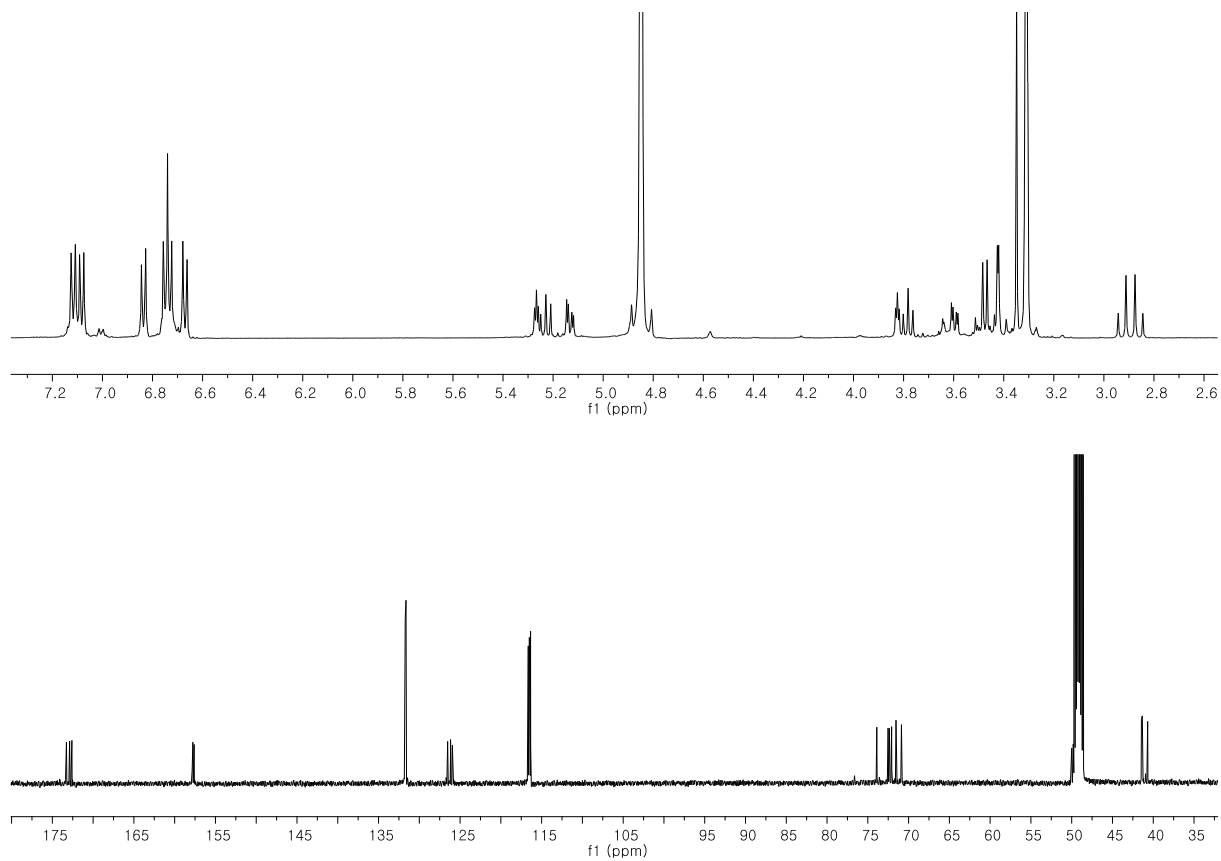


Fig. S57. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **11**

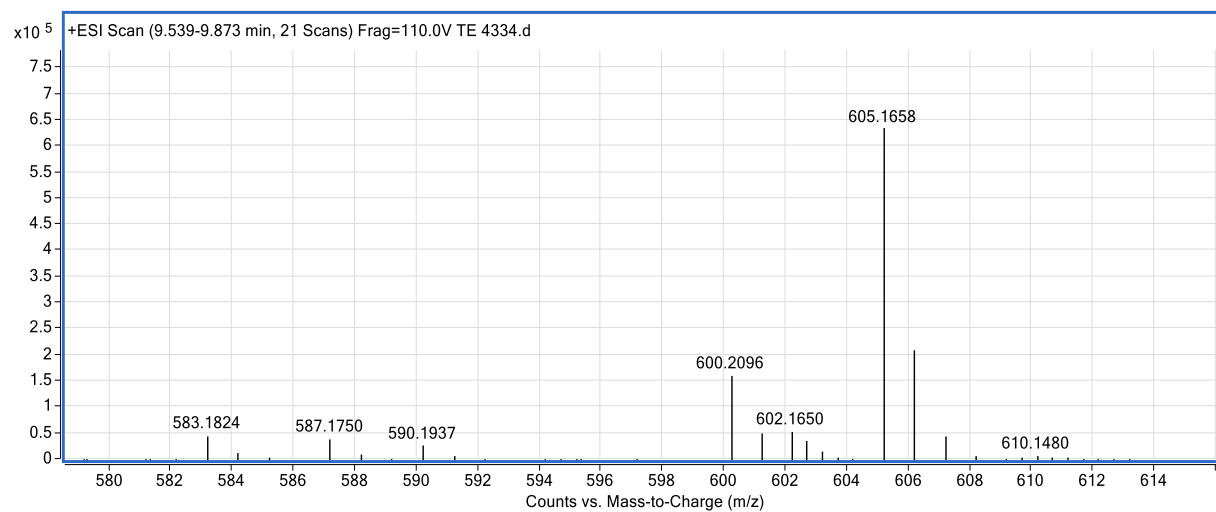


Fig. S58. MS spectrum of compound **11**

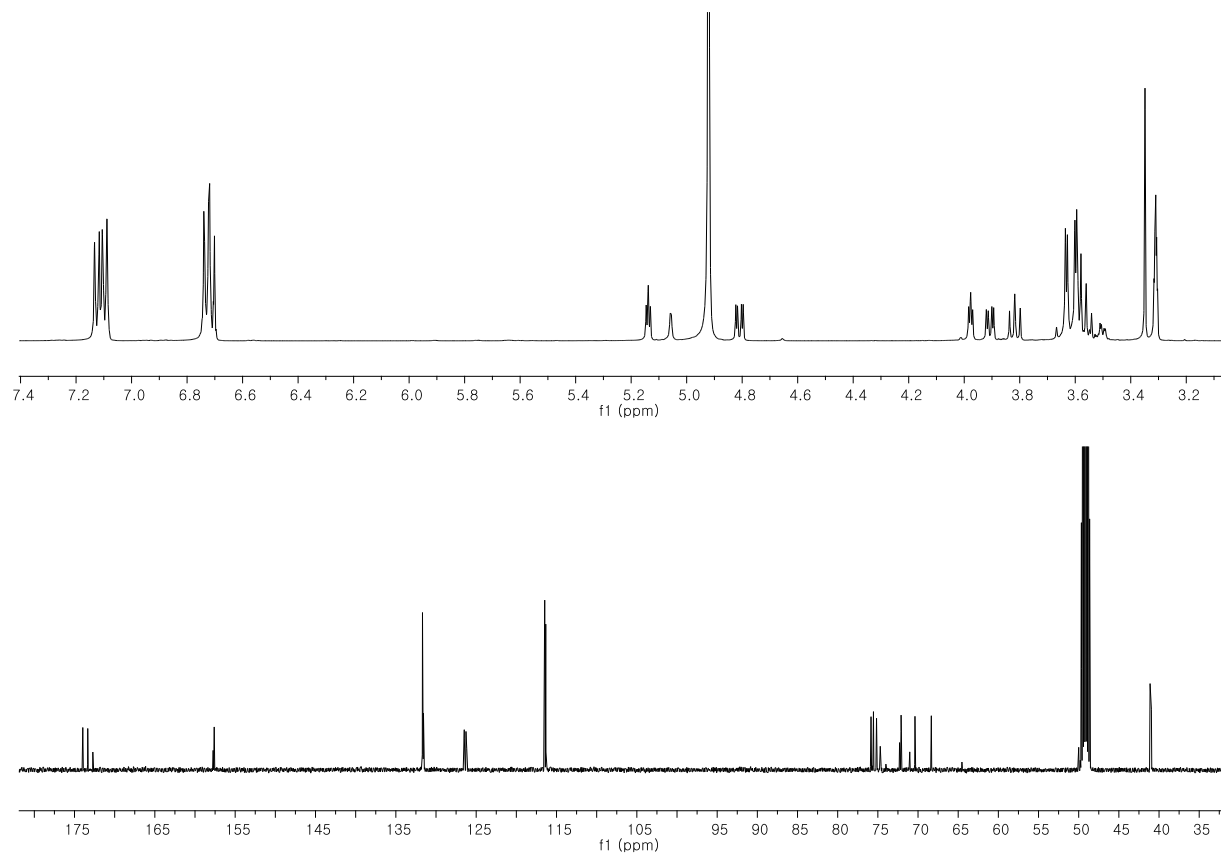


Fig. S59. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **12**

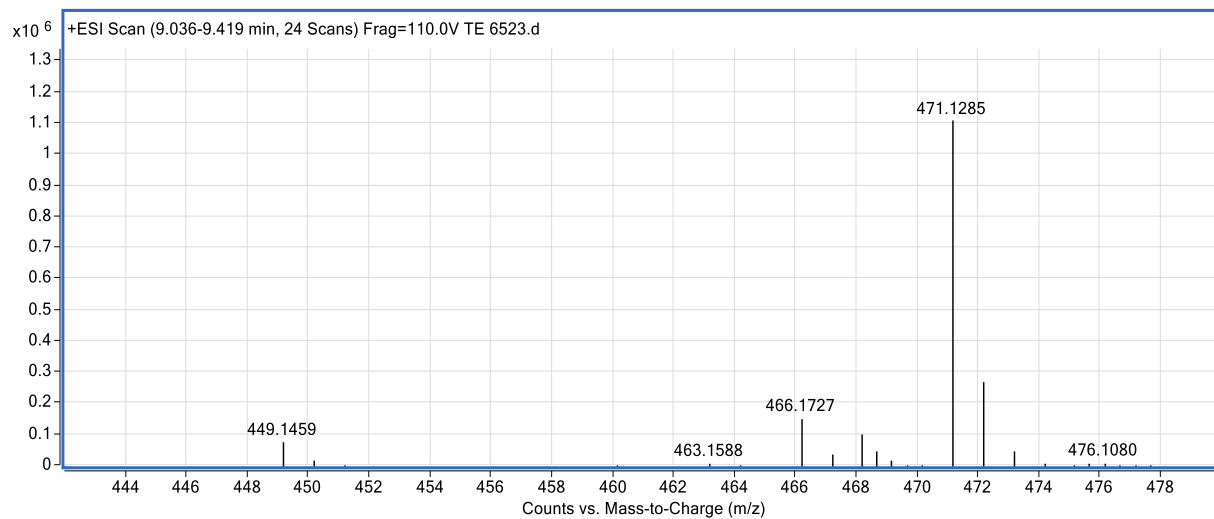


Fig. S60. MS spectrum of compound **12**

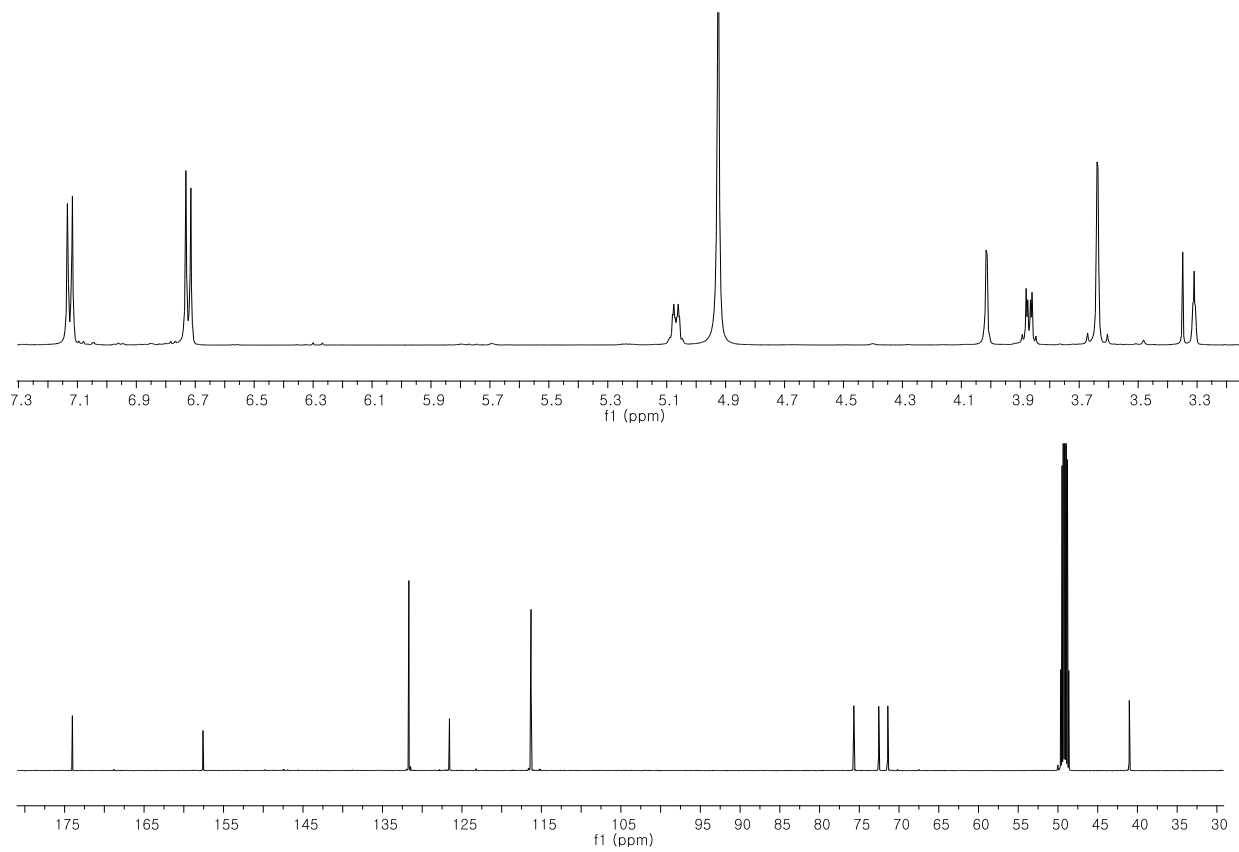


Fig. S61. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **13**

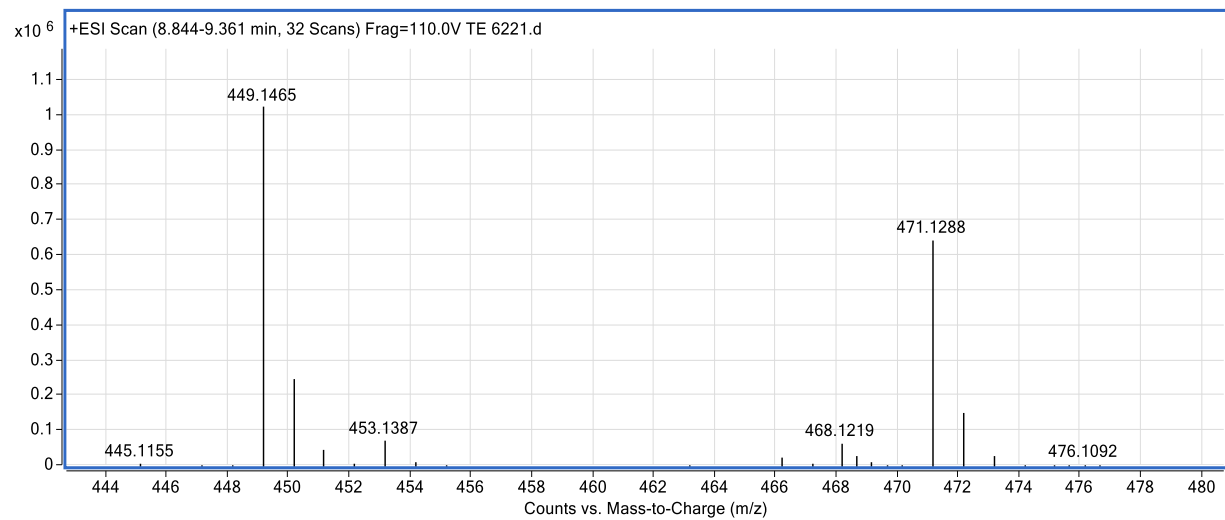


Fig. S62. MS spectrum of compound **13**

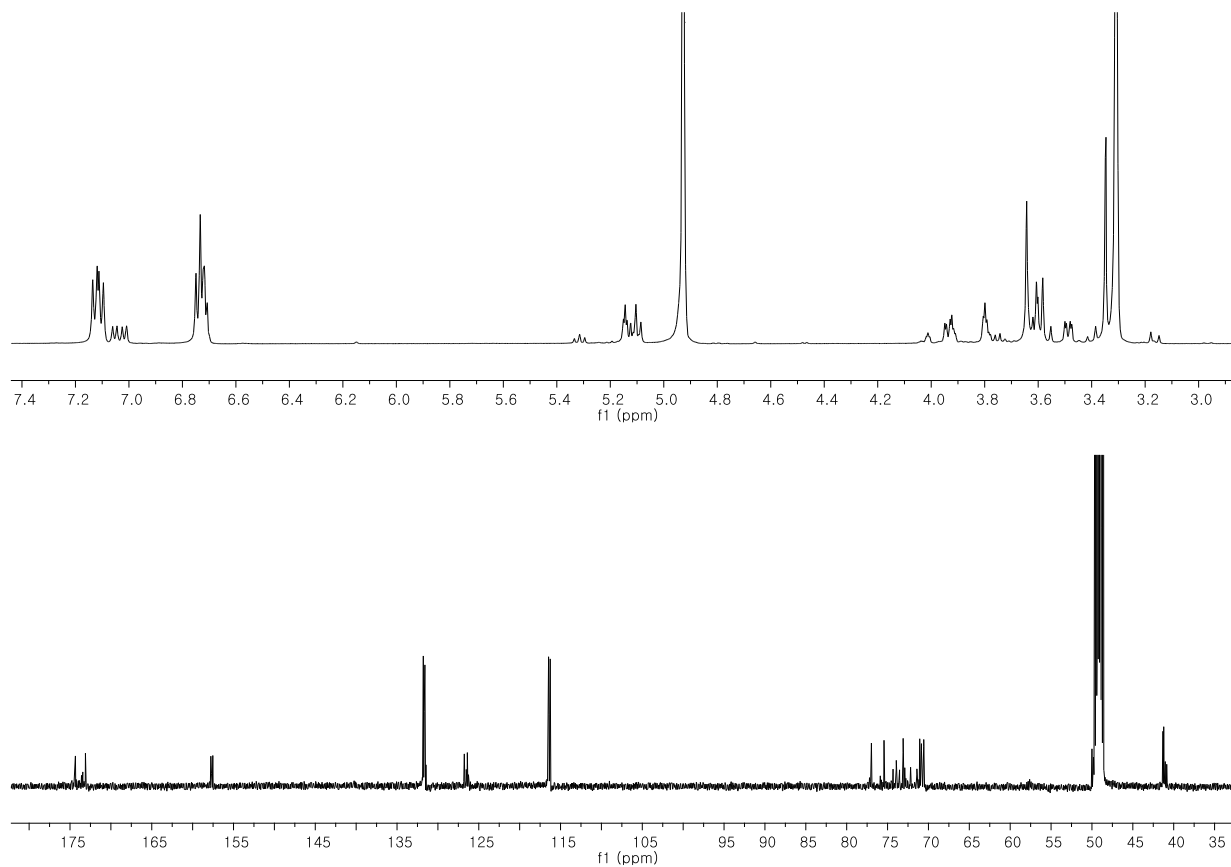


Fig. S63. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **14**

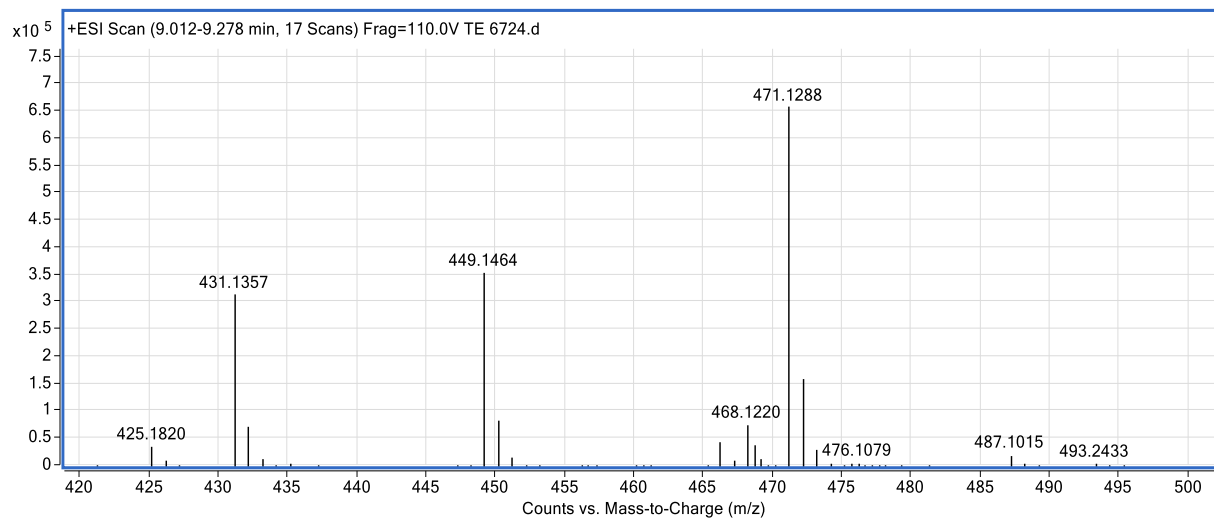


Fig. S64. MS spectrum of compound **14**

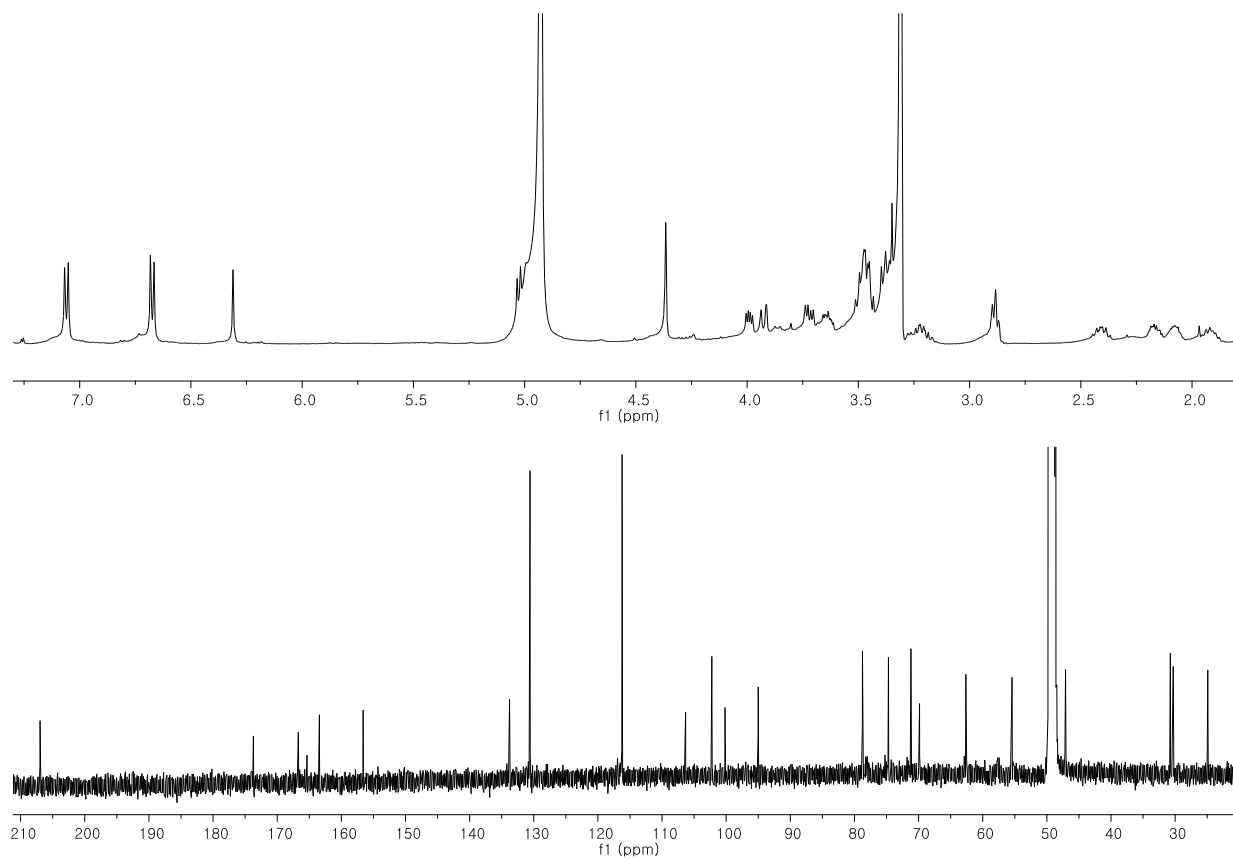


Fig. S65. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **15**

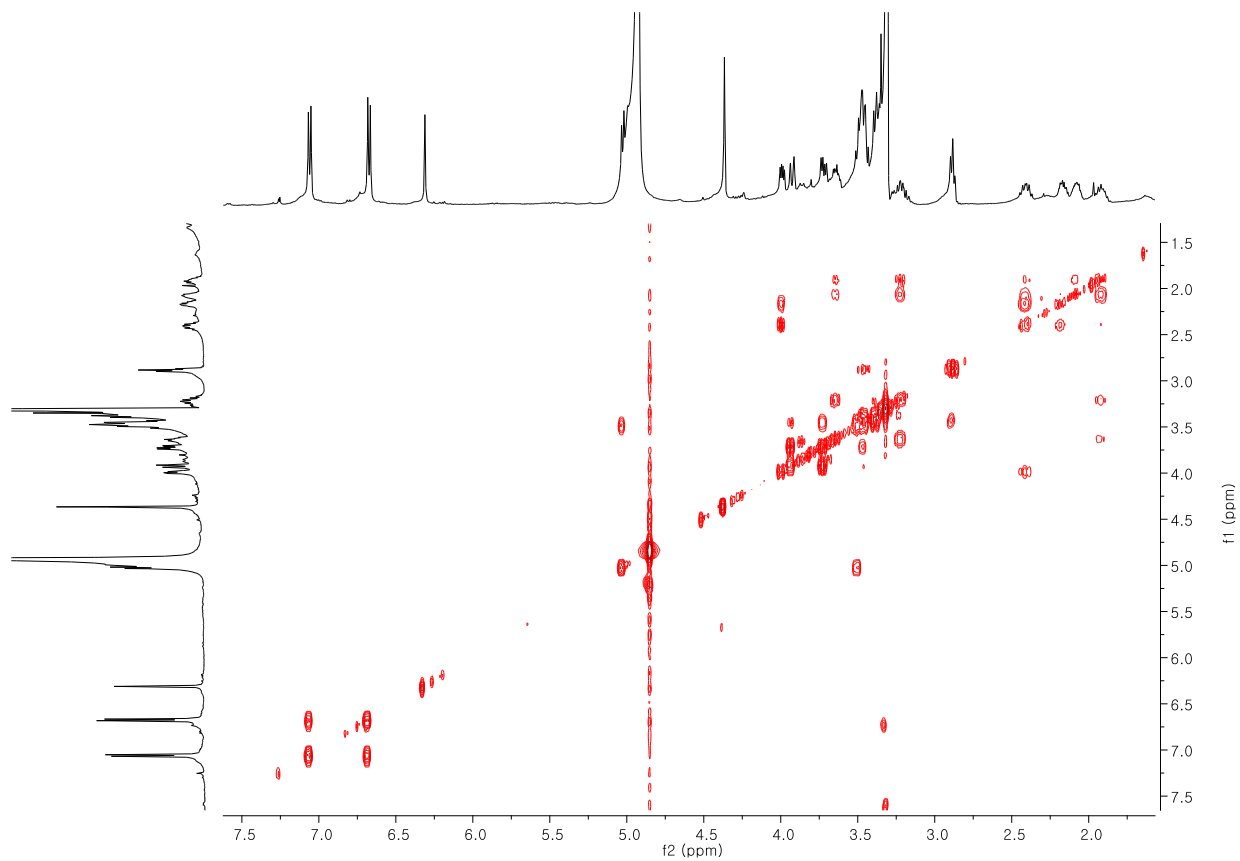


Fig. S66. ^1H - ^1H COSY spectrum of compound **15**

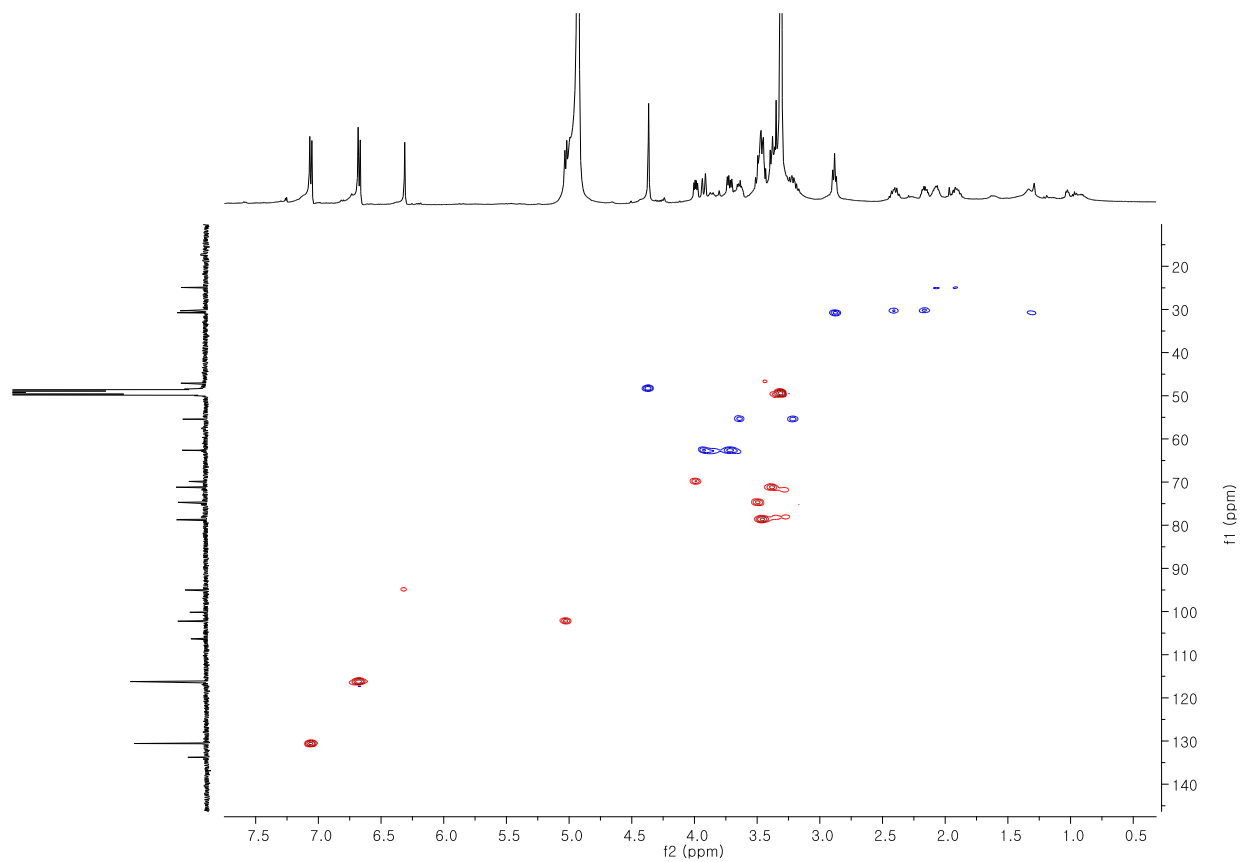


Fig. S67. HSQC spectrum of compound **15**

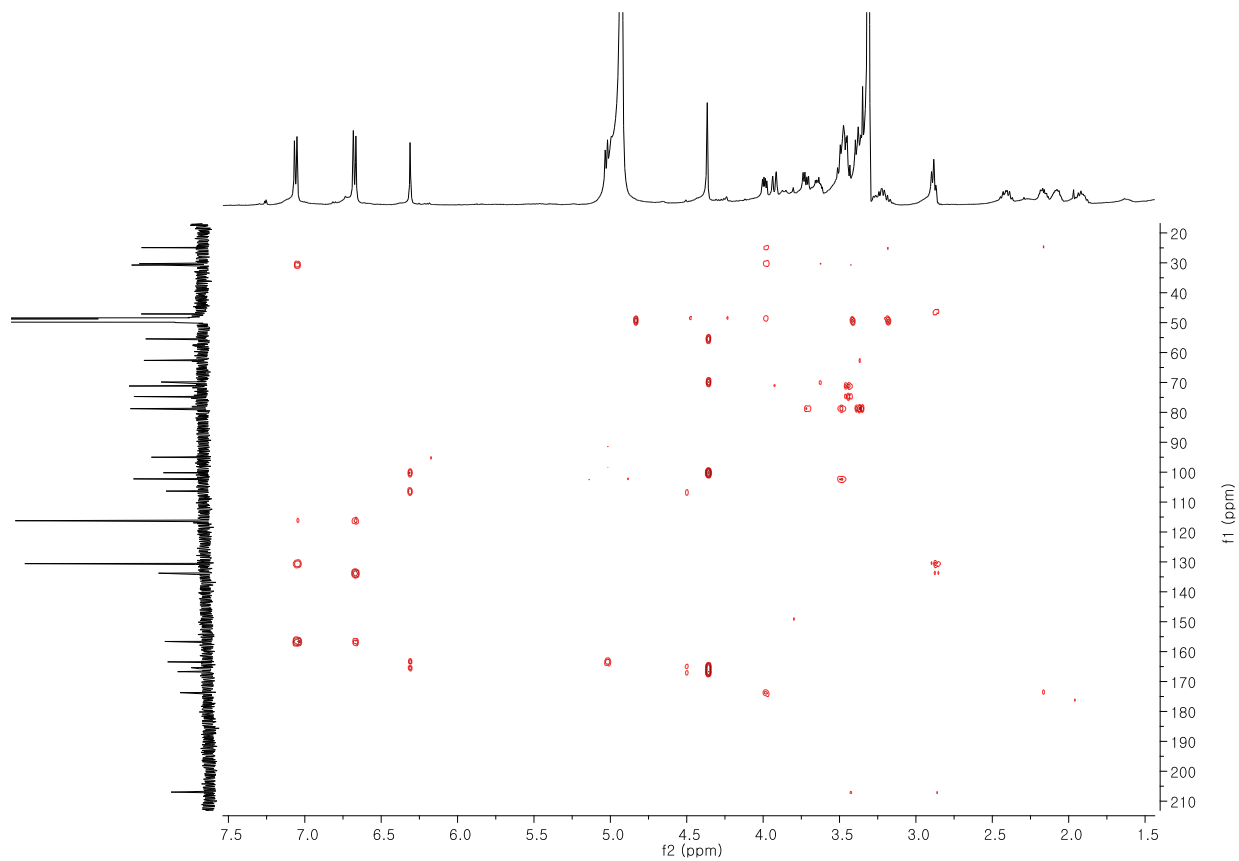


Fig. S68. HMBC spectrum of compound **15**

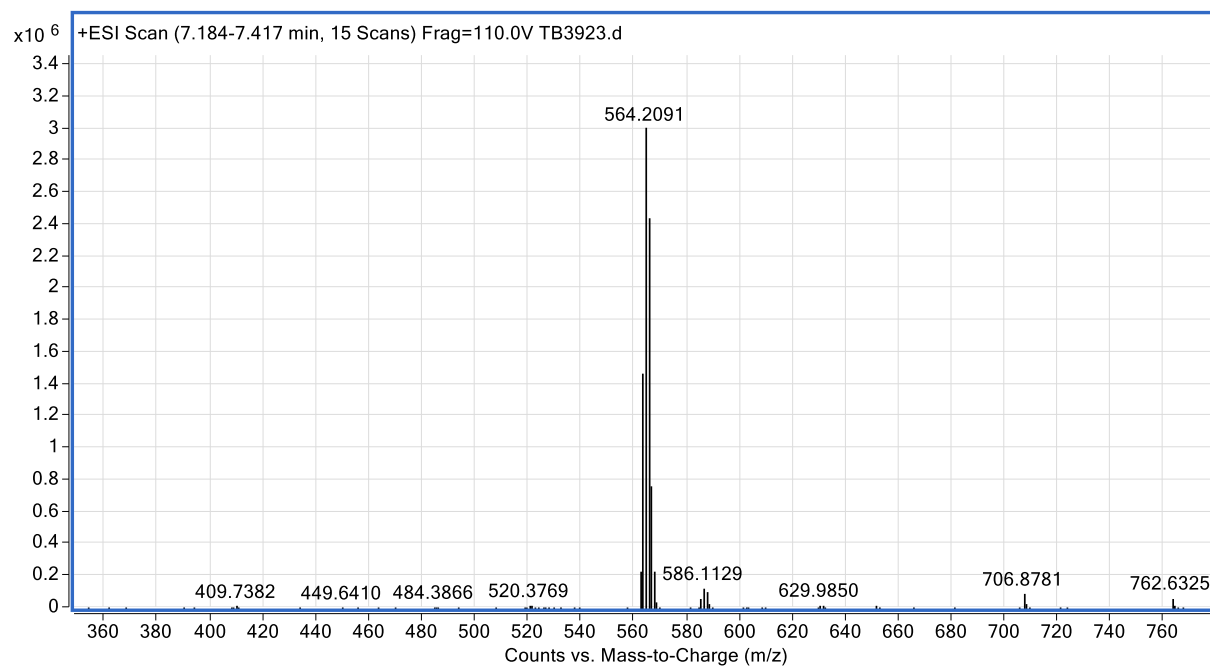


Fig. S69. MS spectrum of compound **15**

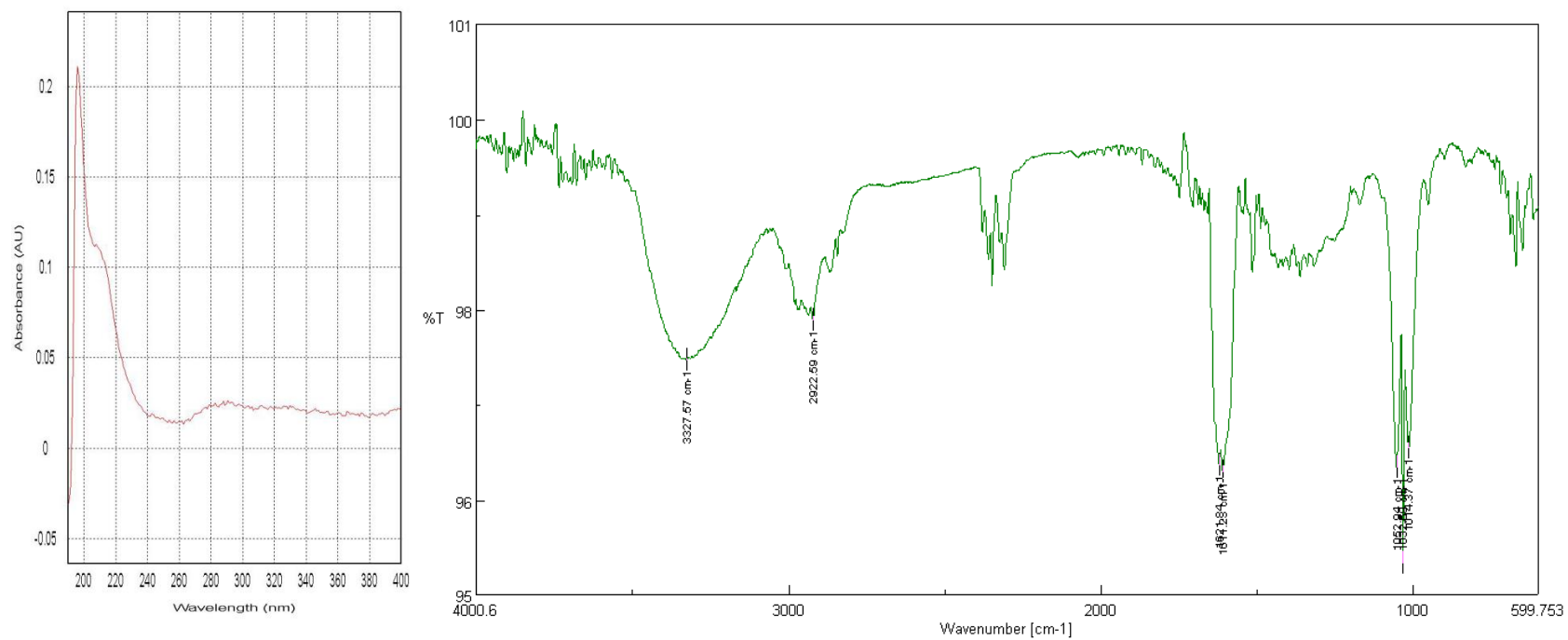


Fig. S70. UV, IR spectra of compound **15**

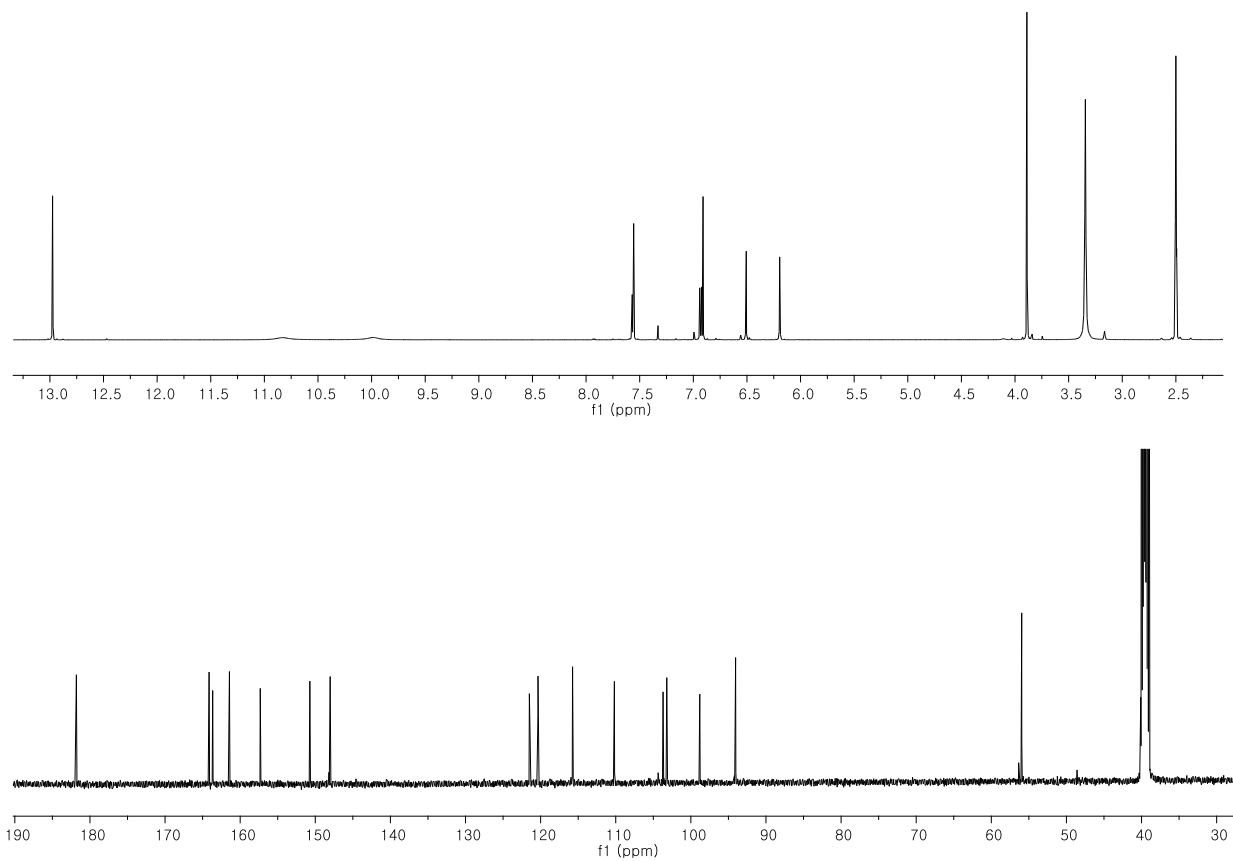


Fig. S71. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **16**

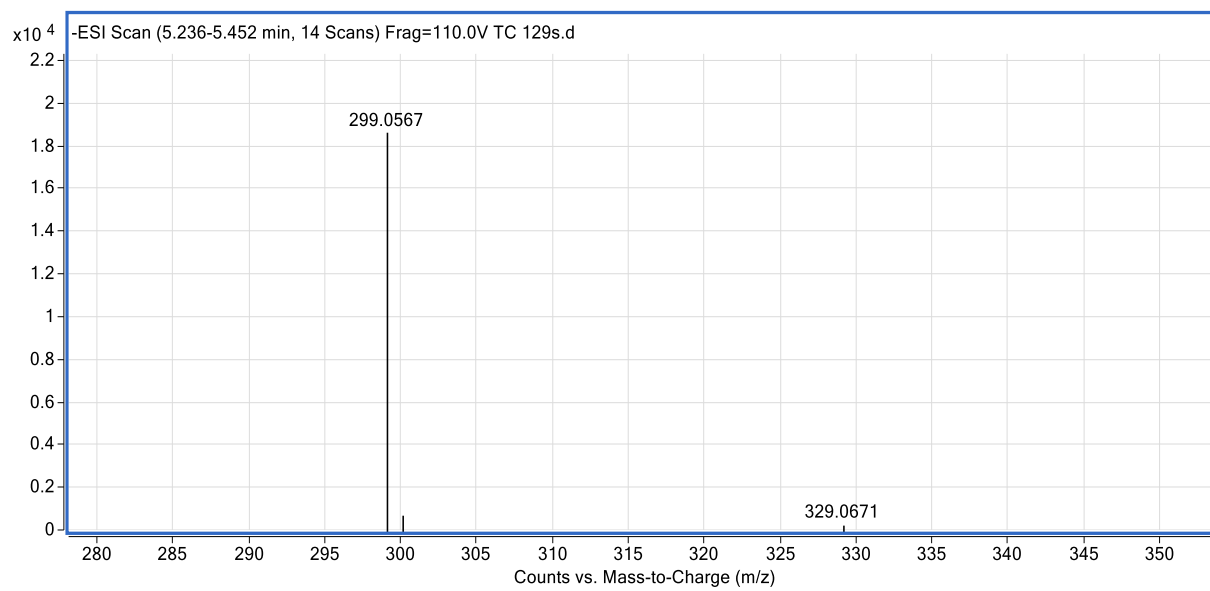


Fig. S72. MS spectrum of compound **16**

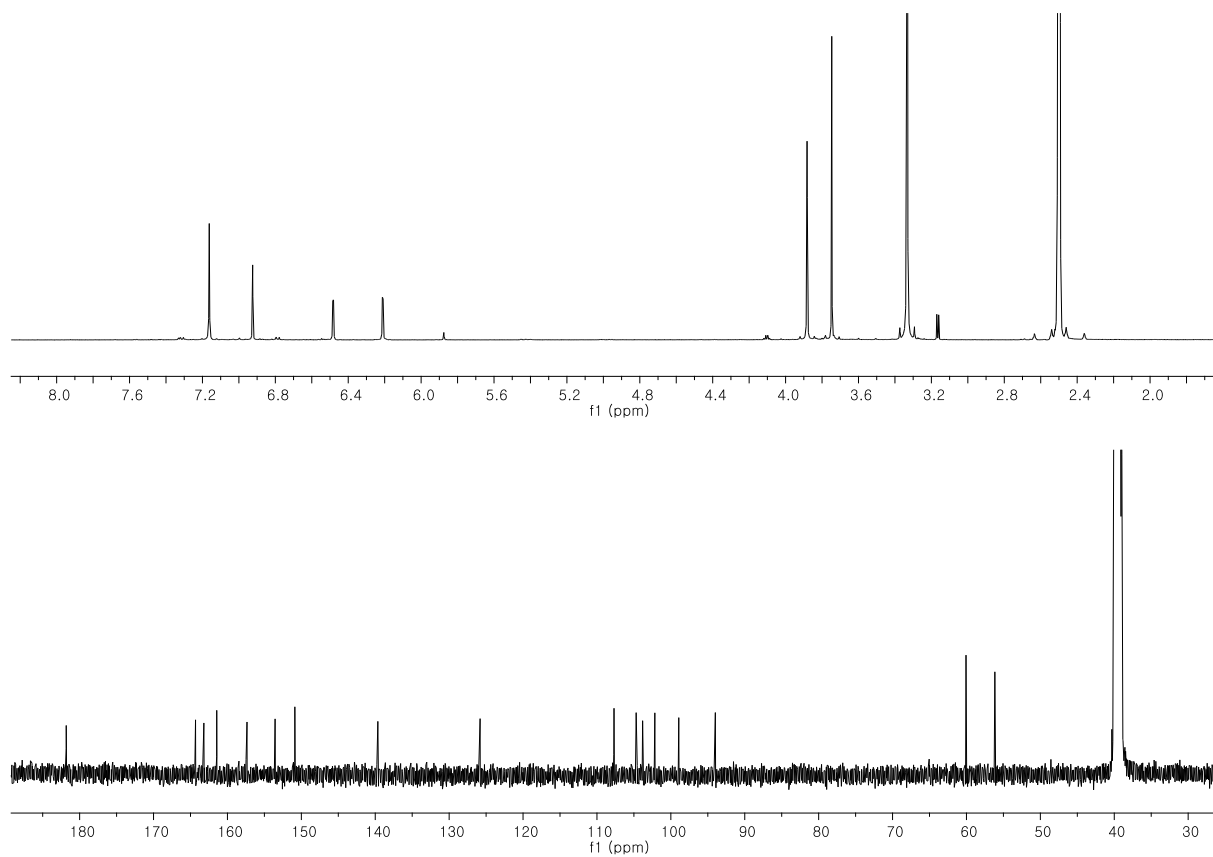


Fig. S73. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **17**

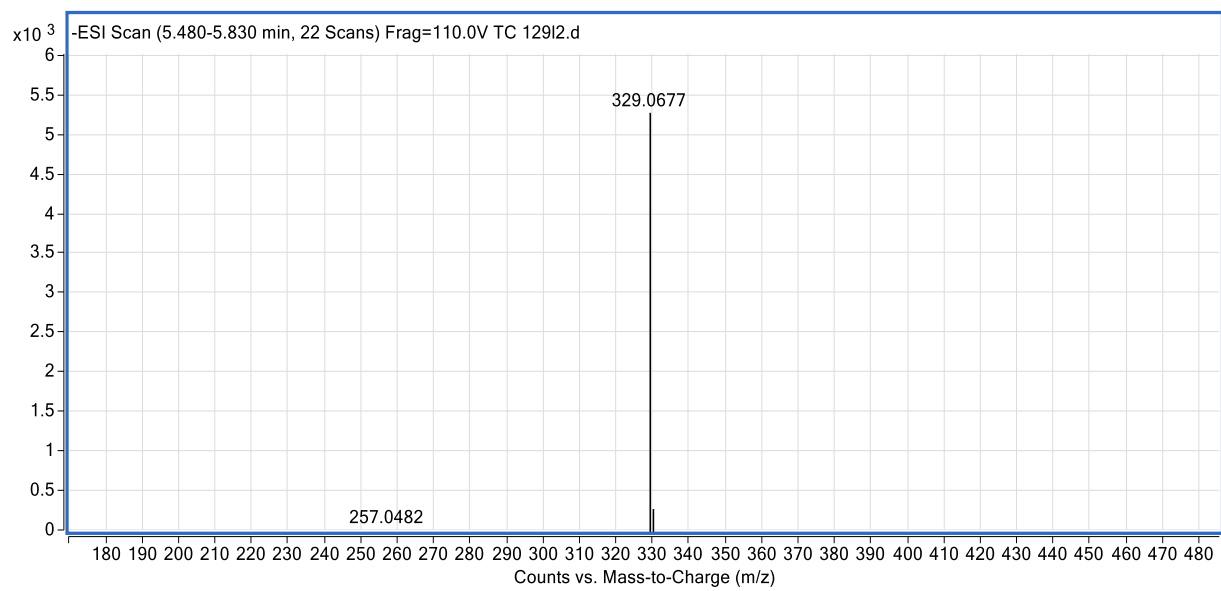


Fig. S74. MS spectrum of compound **17**

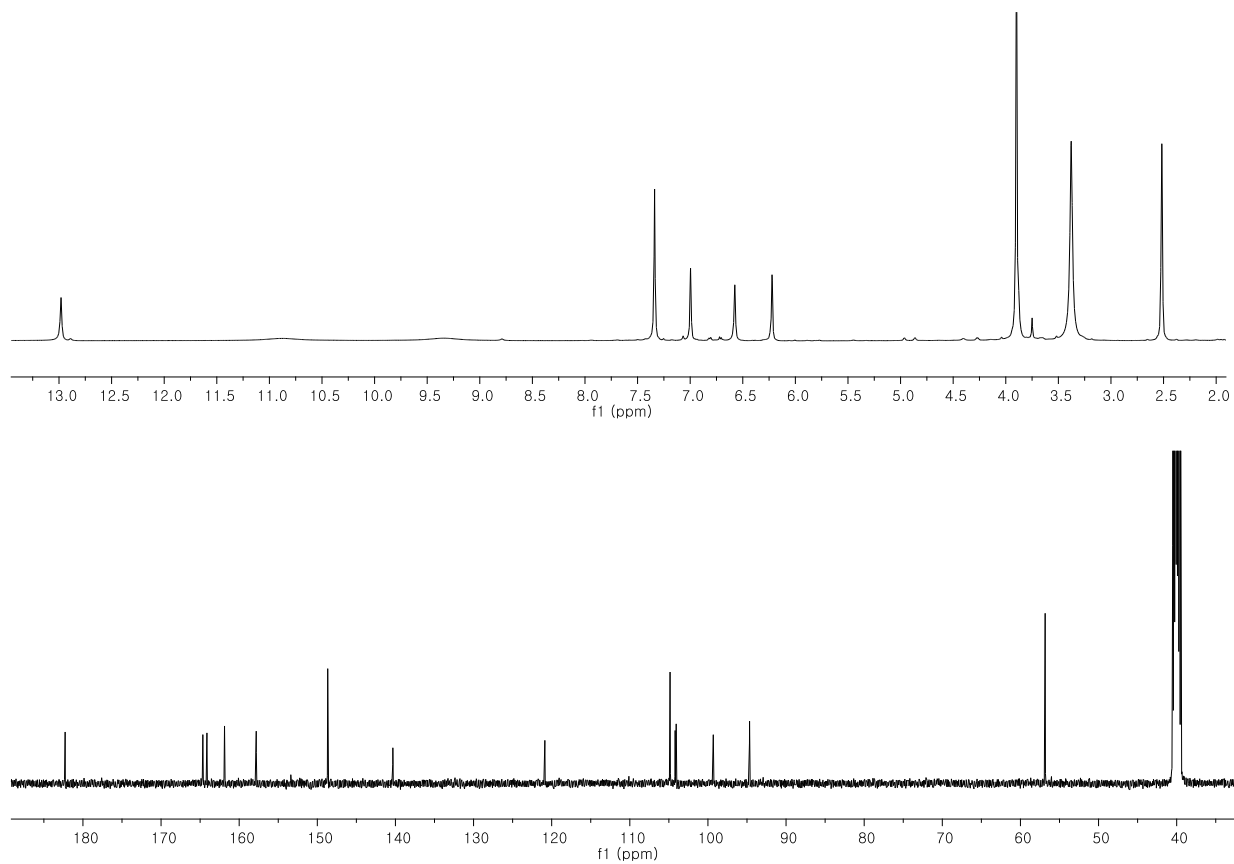


Fig. S75. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **18**

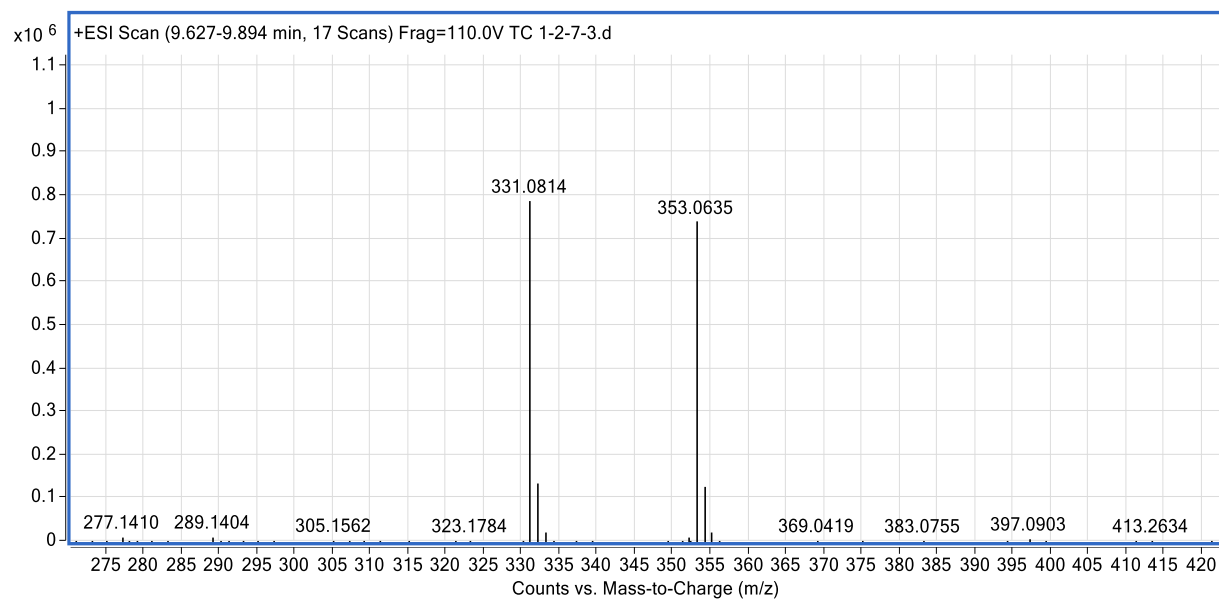


Fig. S76. MS spectrum of compound **18**

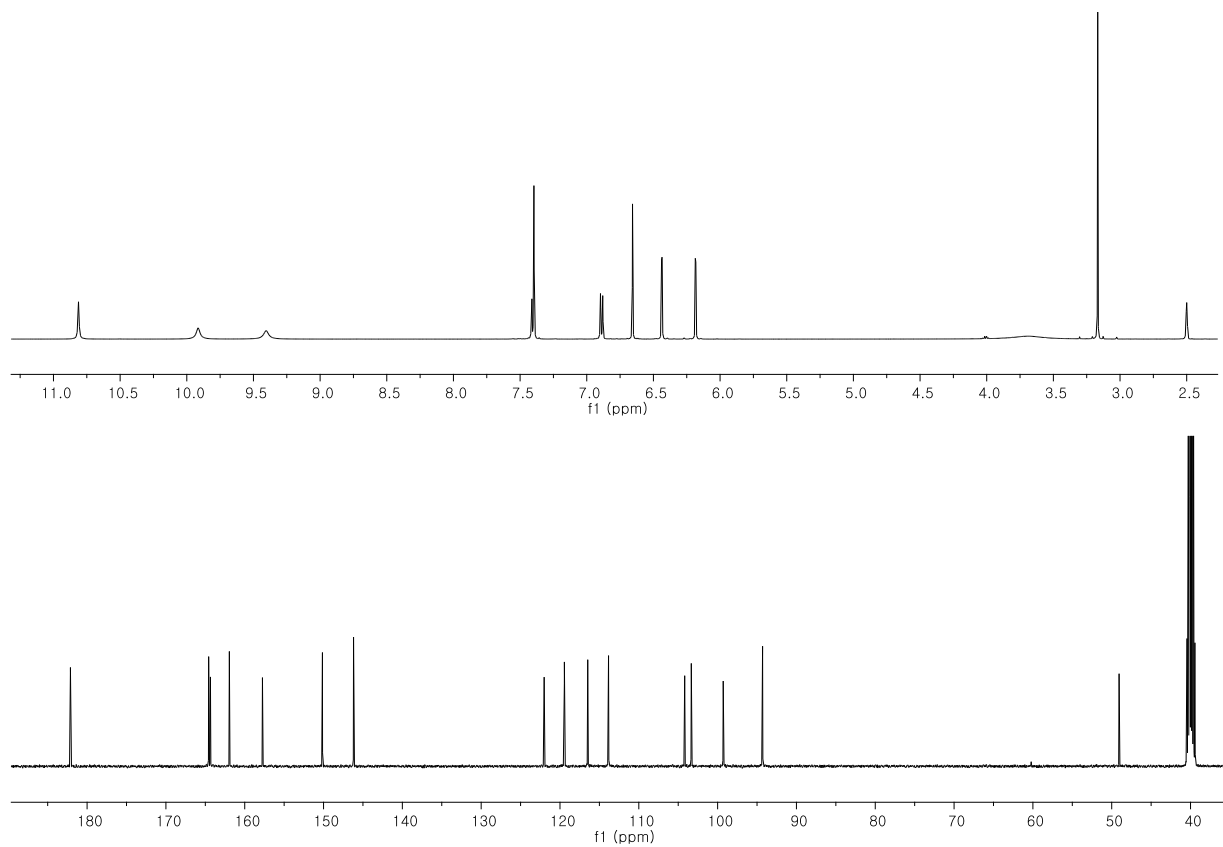


Fig. S77. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **19**

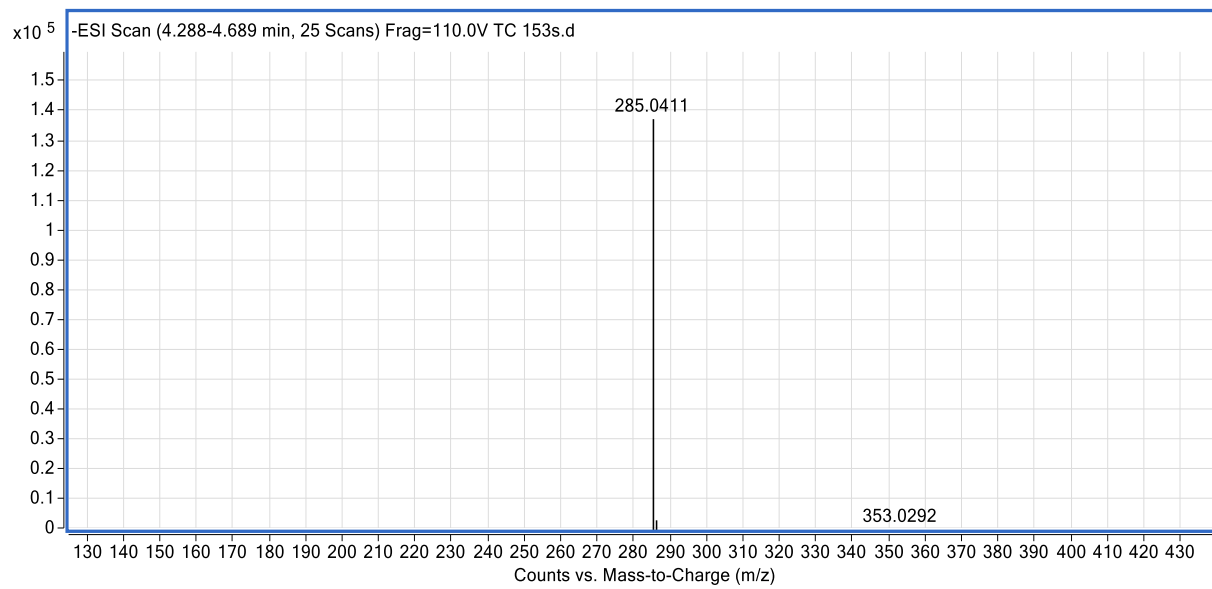


Fig. S78. MS spectrum of compound **19**

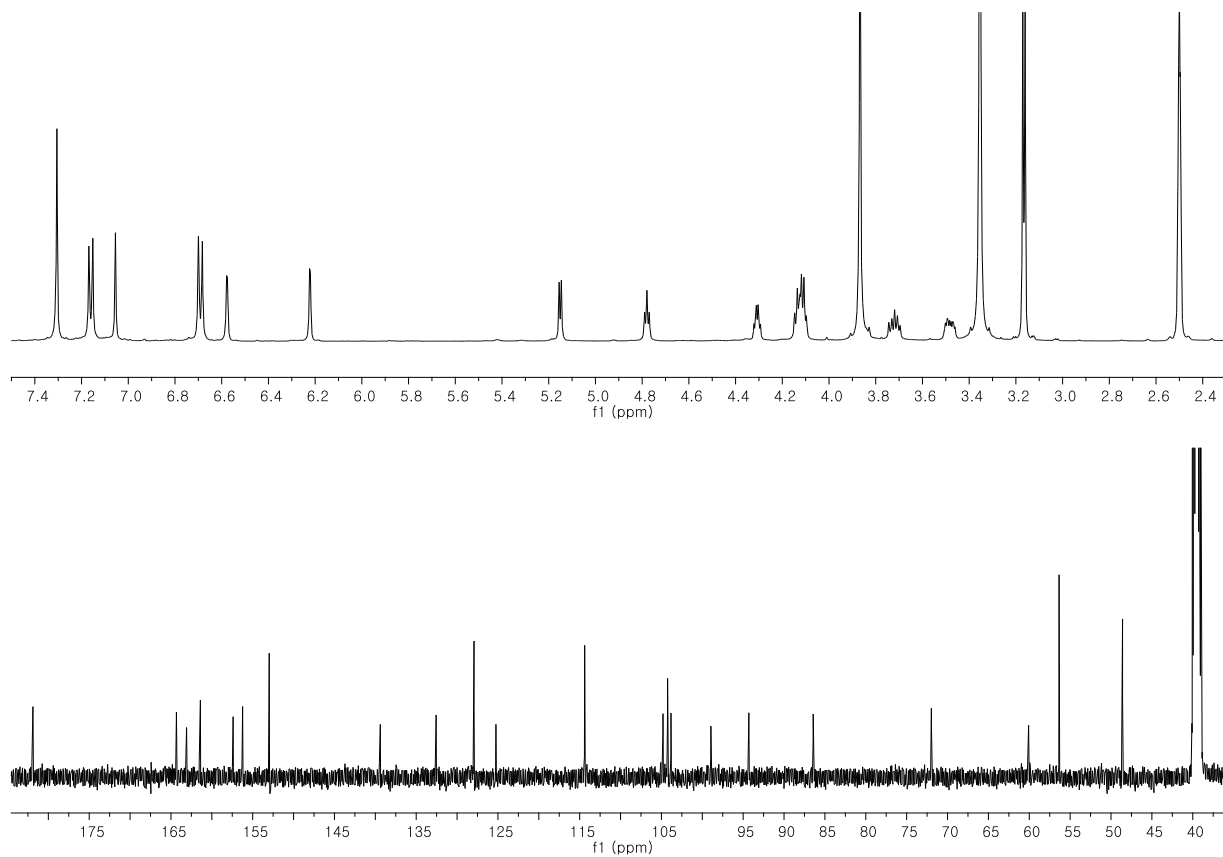


Fig. S79. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **20**

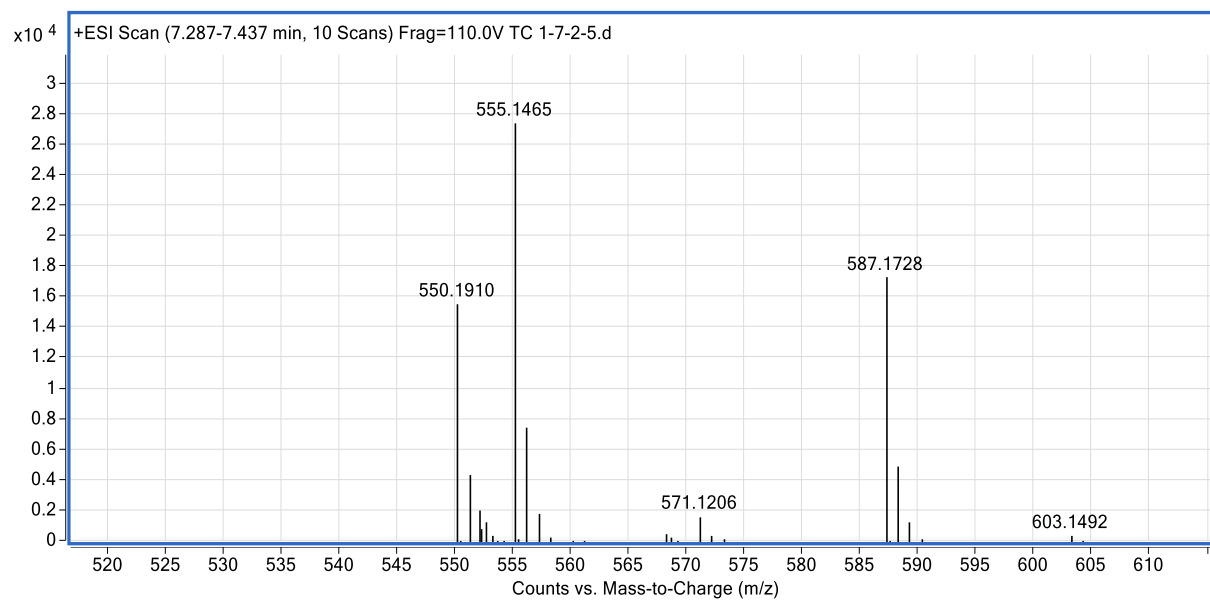


Fig. S80. MS spectrum of compound **20**

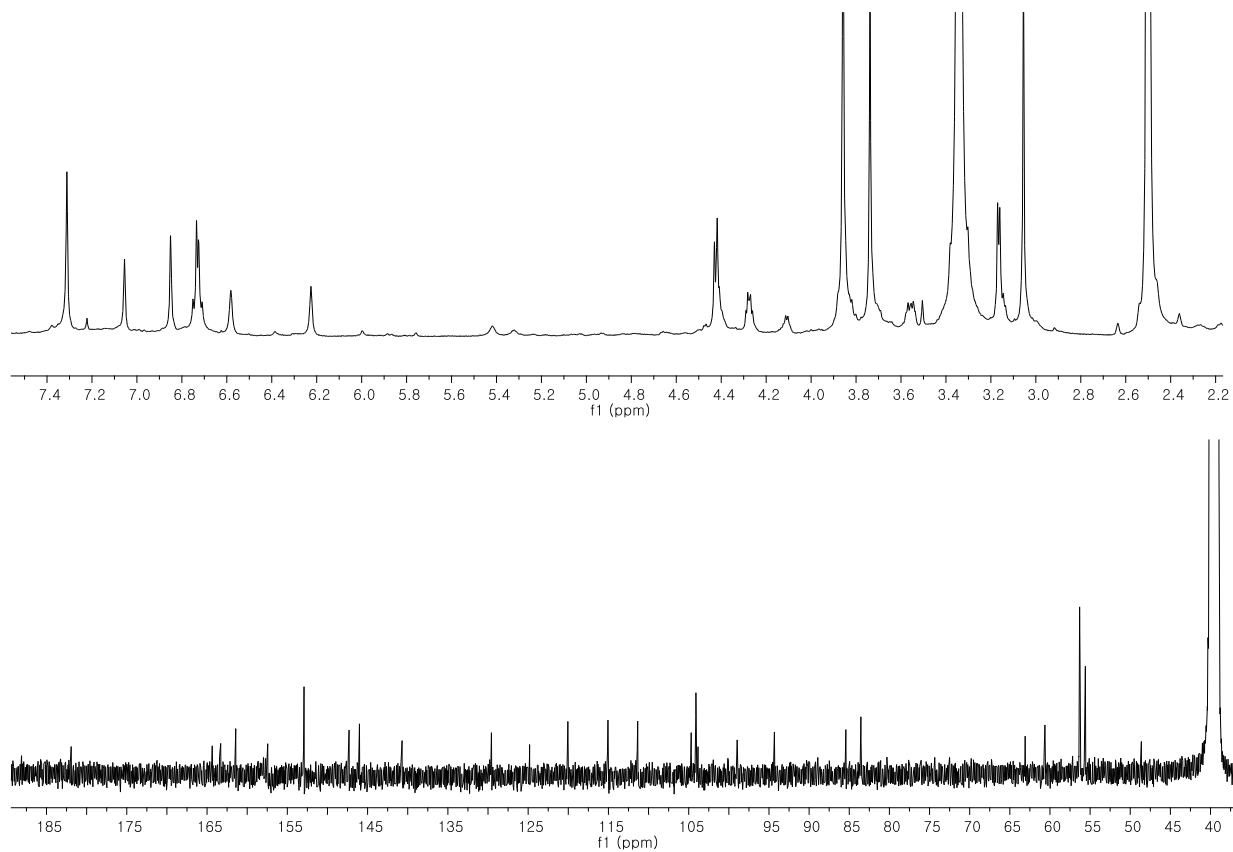


Fig. S81. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **21**

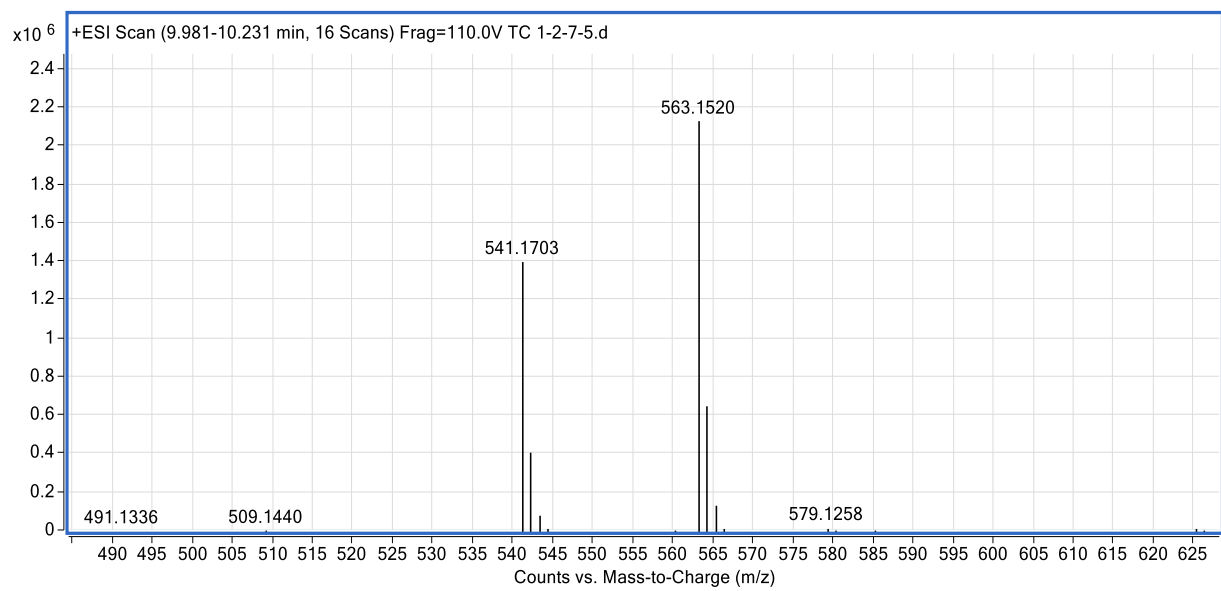


Fig. S82. MS spectrum of compound **21**

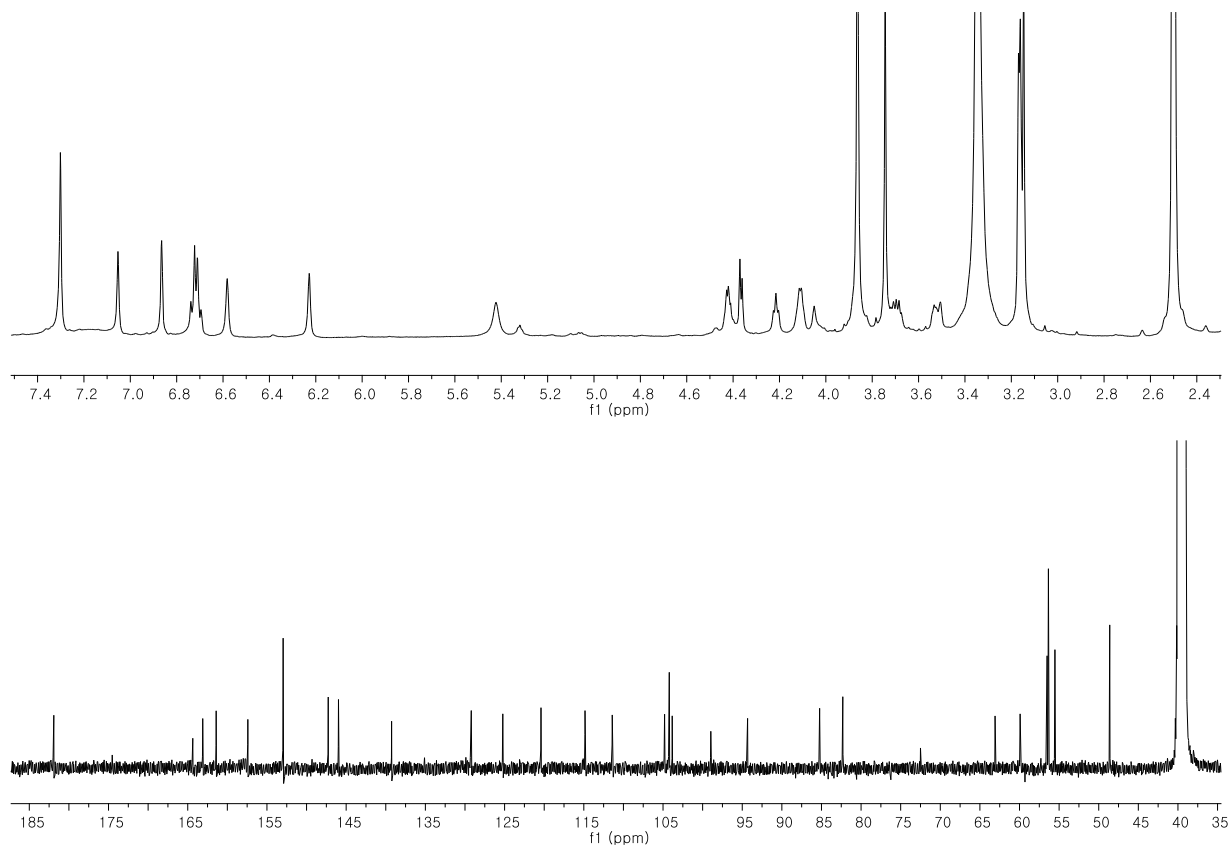


Fig. S83. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **22**

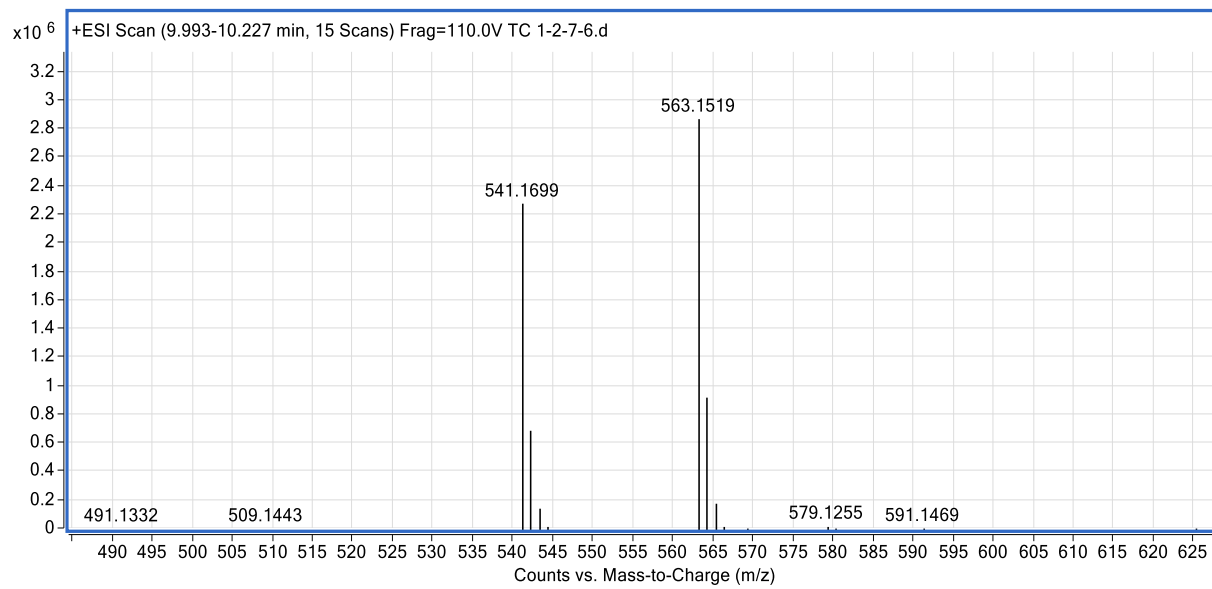


Fig. S84. MS spectrum of compound **22**

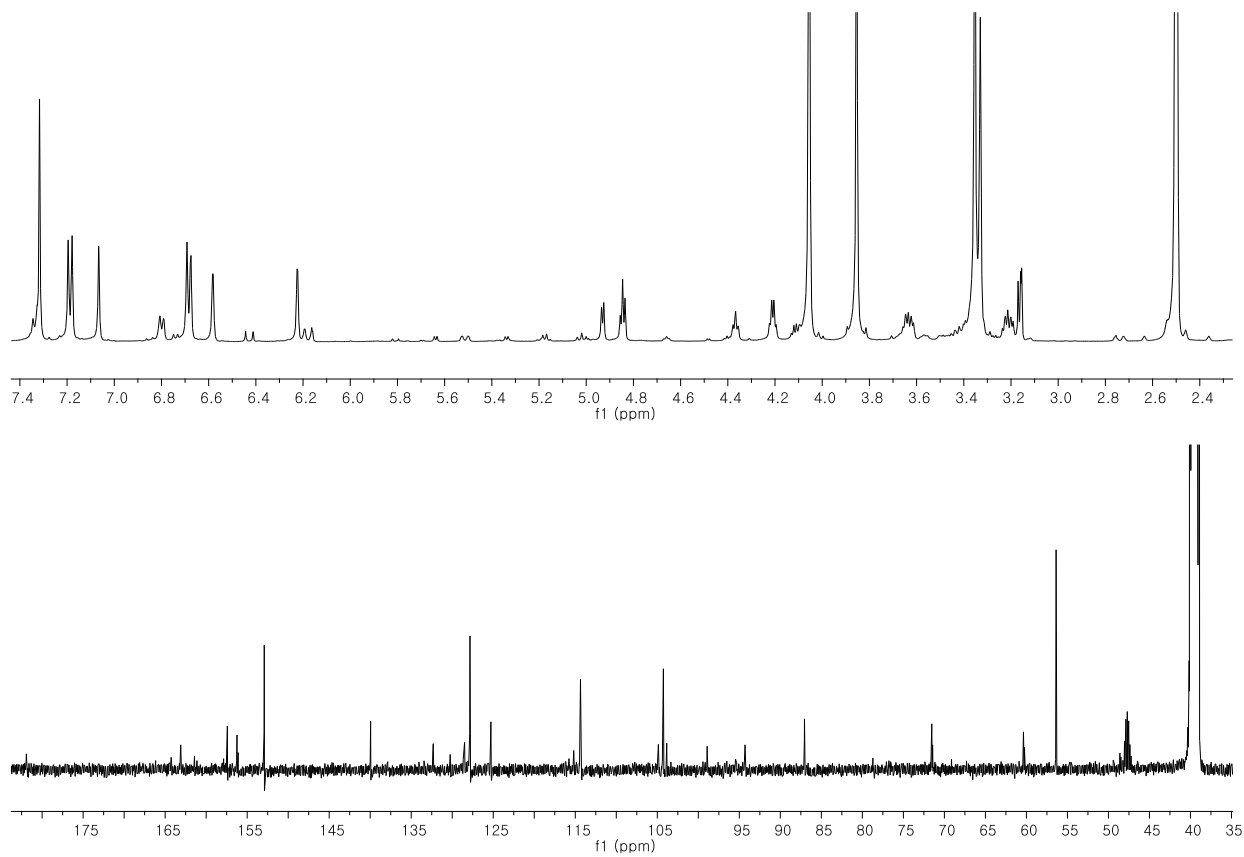


Fig. S85. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **23**

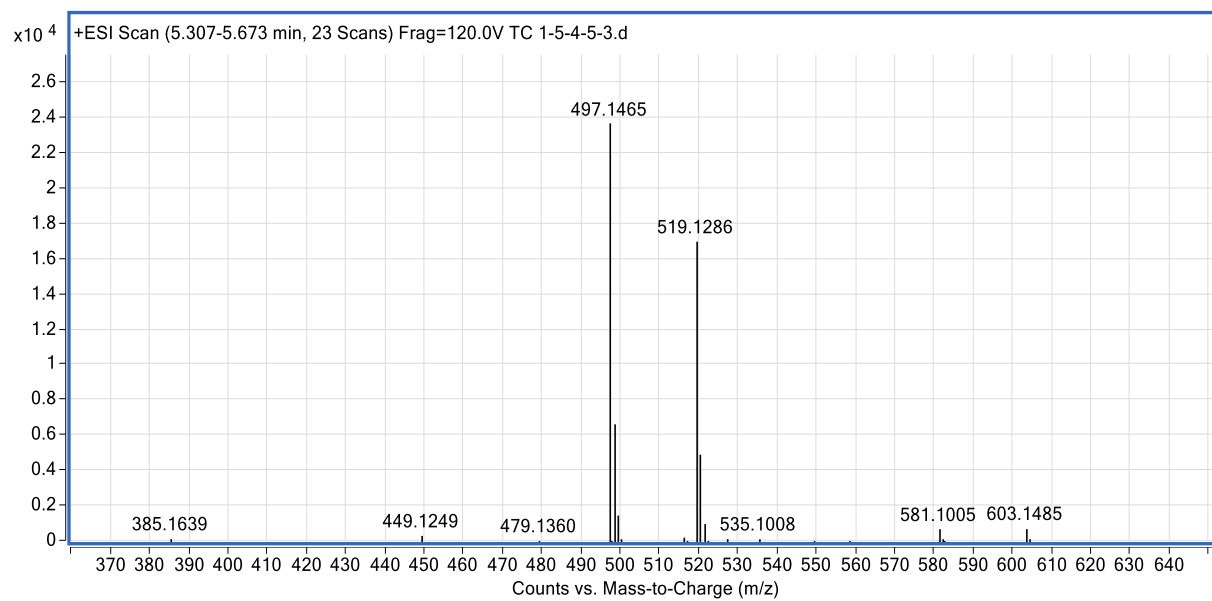


Fig. S86. MS spectrum of compound **23**

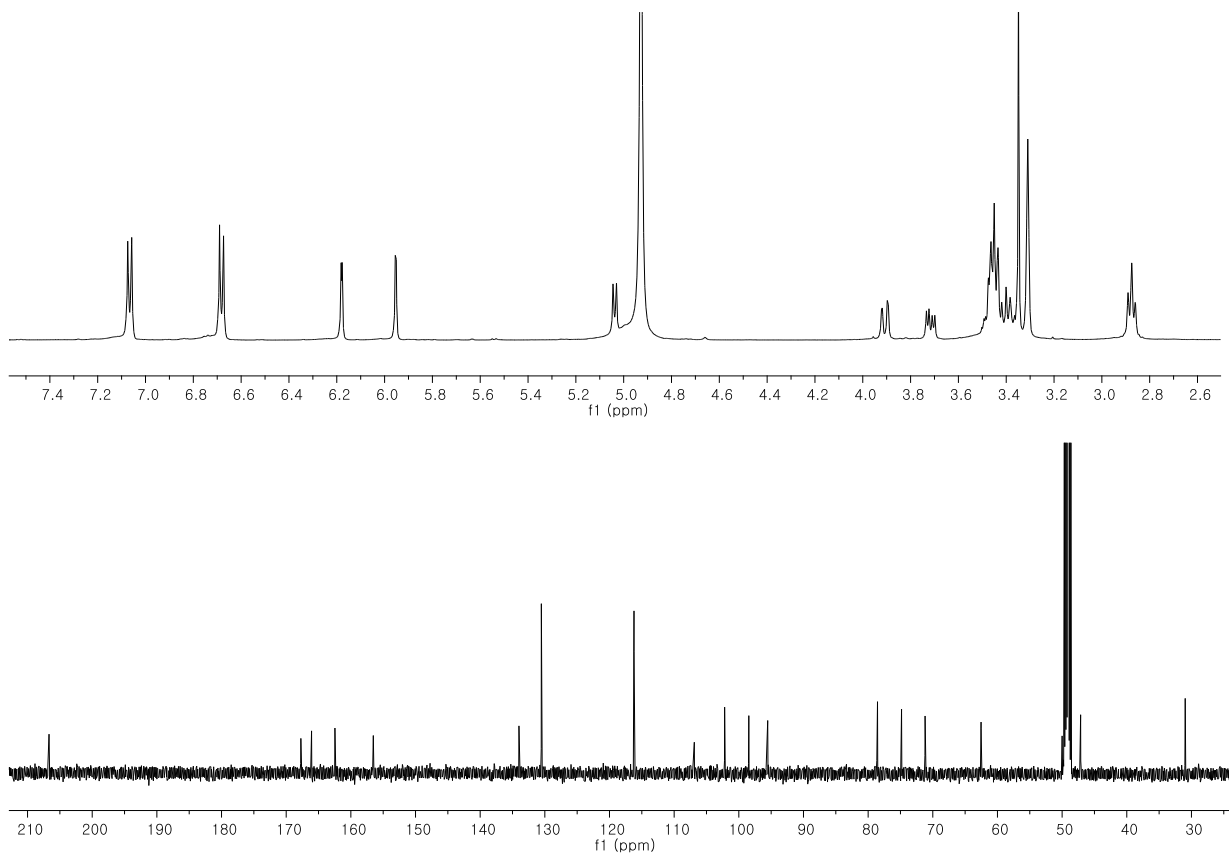


Fig. S87. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **24**

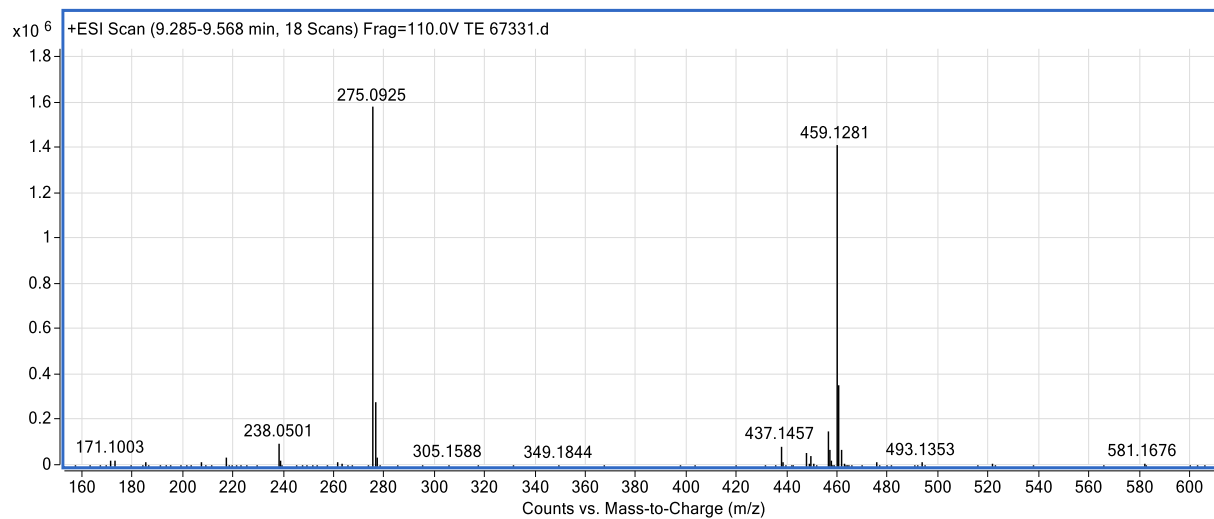


Fig. S88. MS spectrum of compound **24**

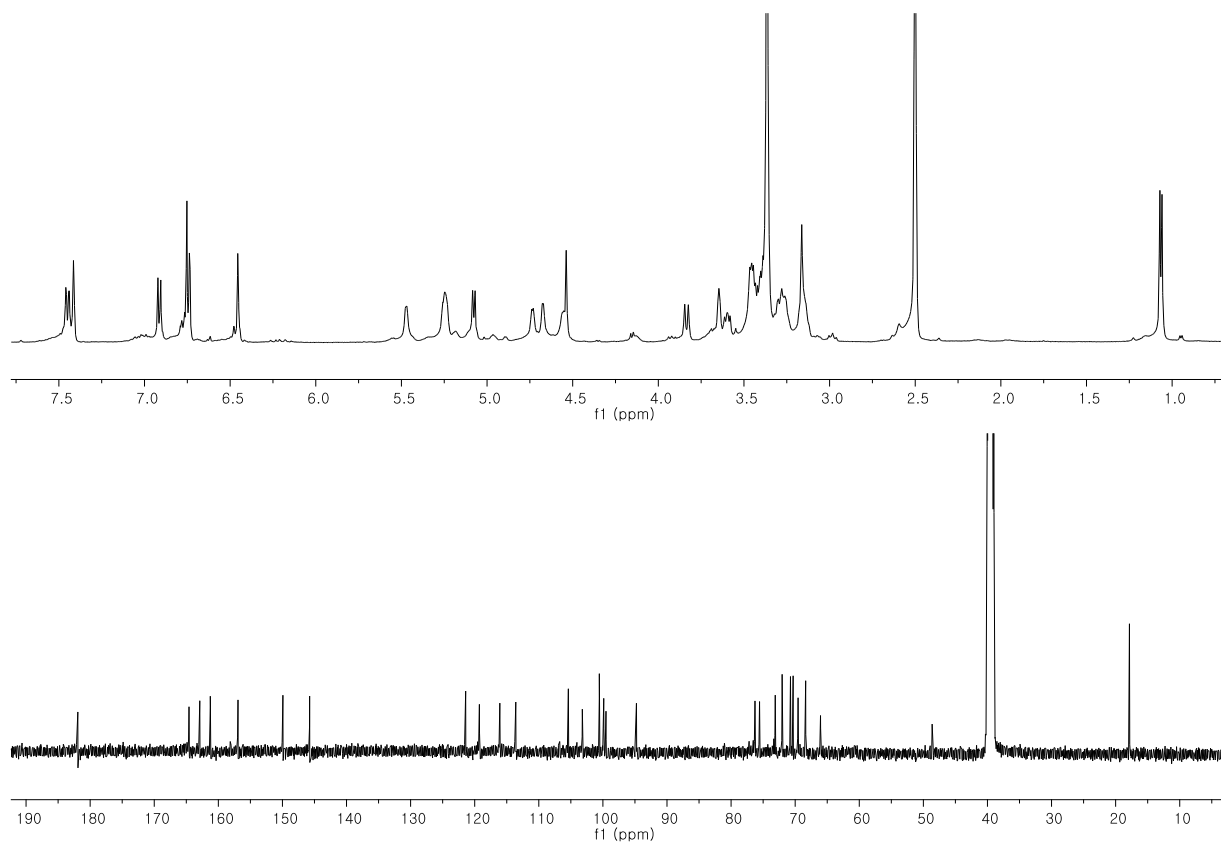


Fig. S89. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **25**

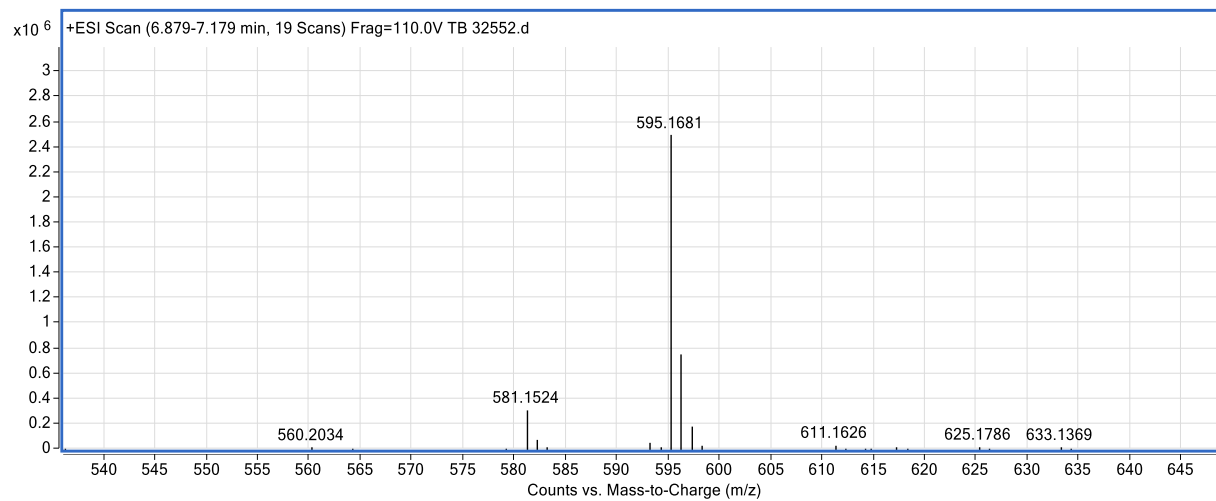


Fig. S90. MS spectrum of compound **25**

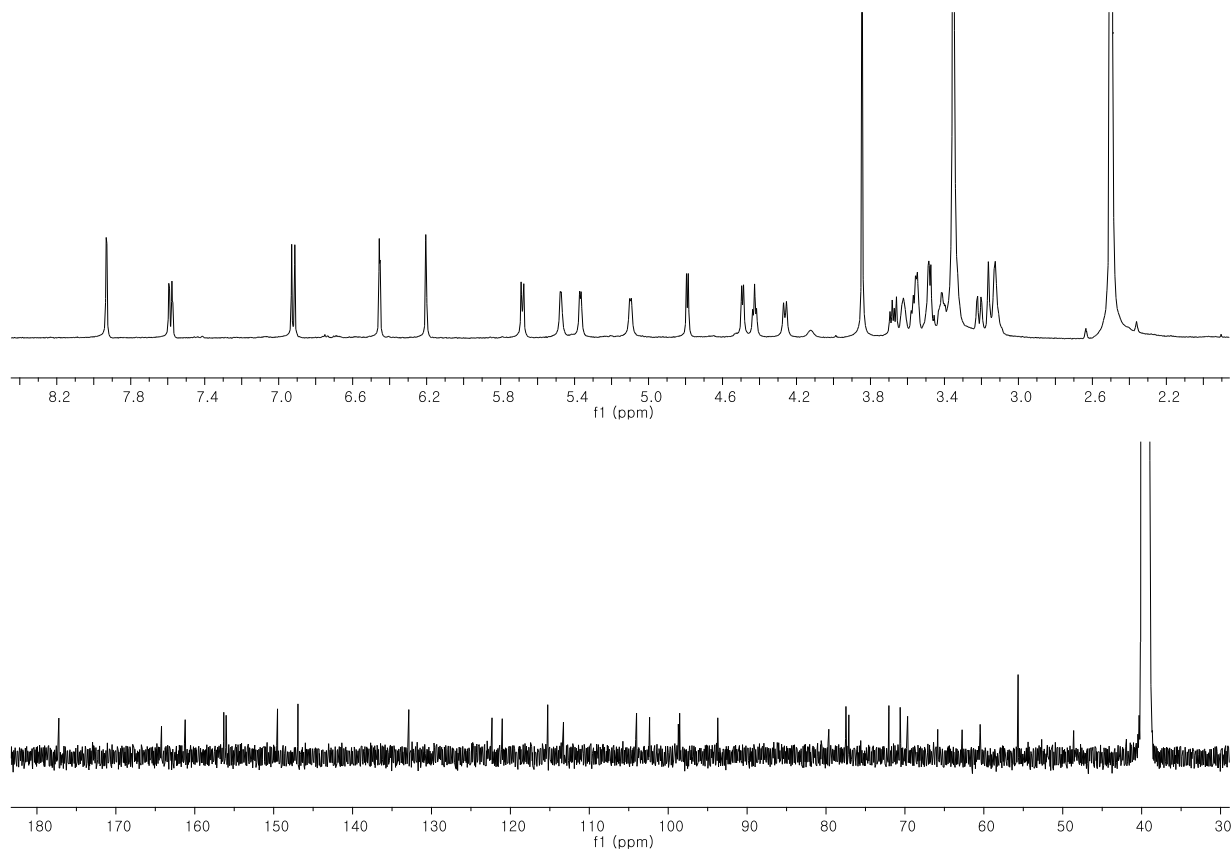


Fig. S91. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **26**

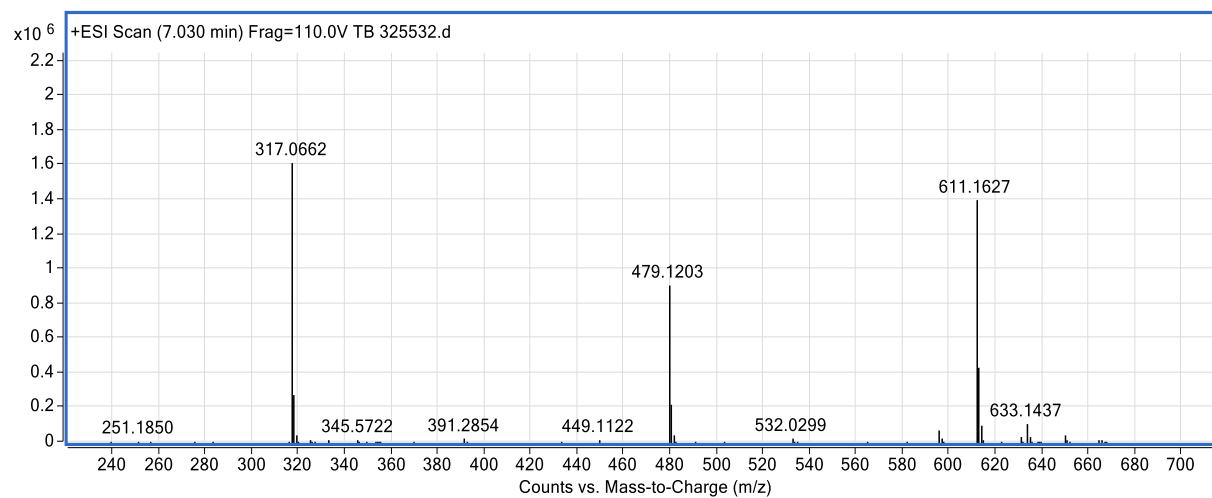


Fig. S92. MS spectrum of compound **26**

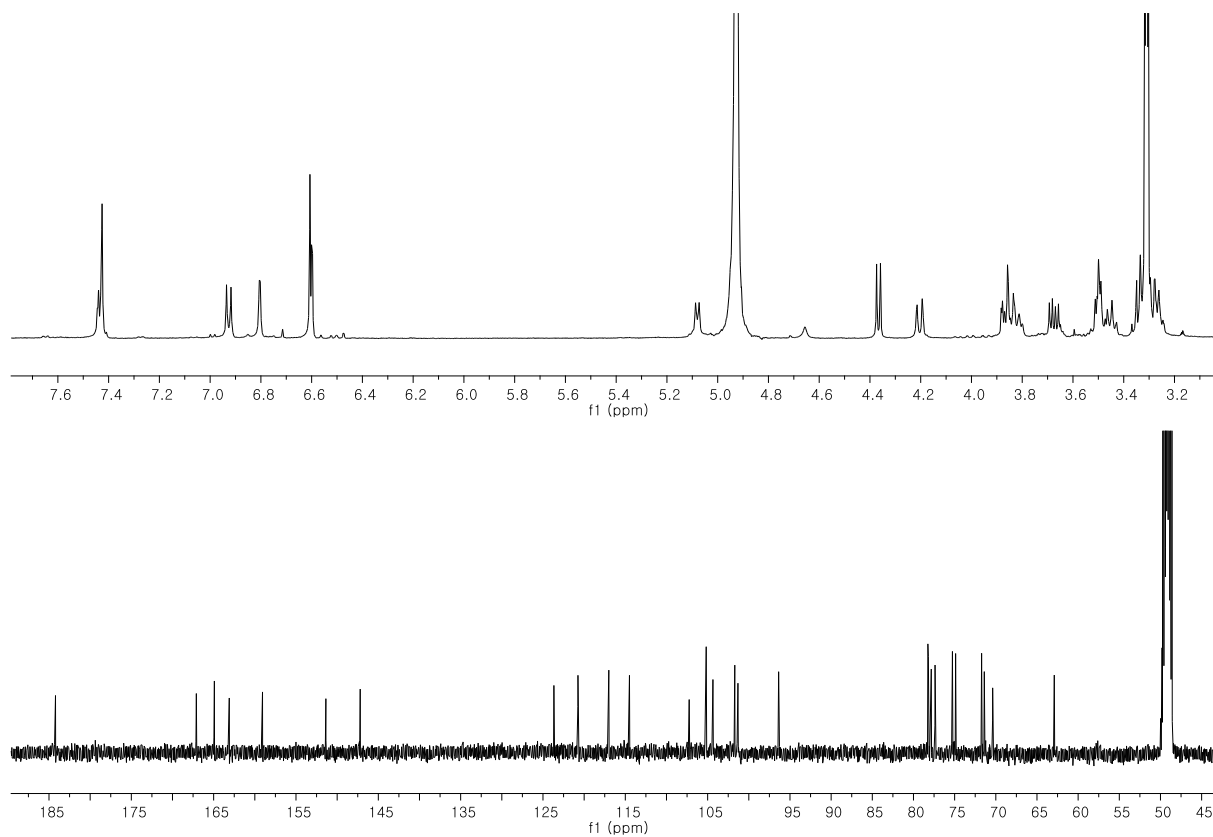


Fig. S93. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **27**

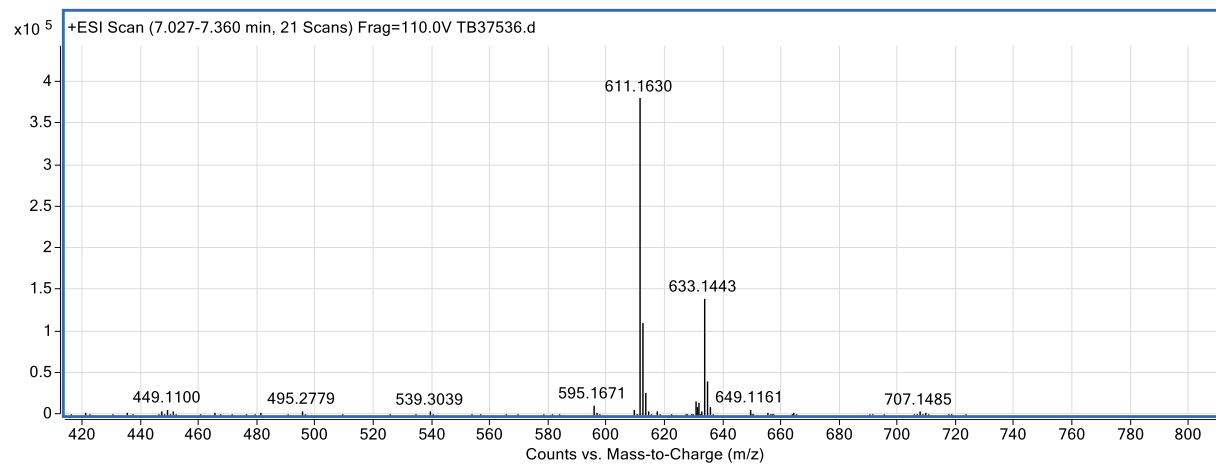


Fig. S94. MS spectrum of compound **27**

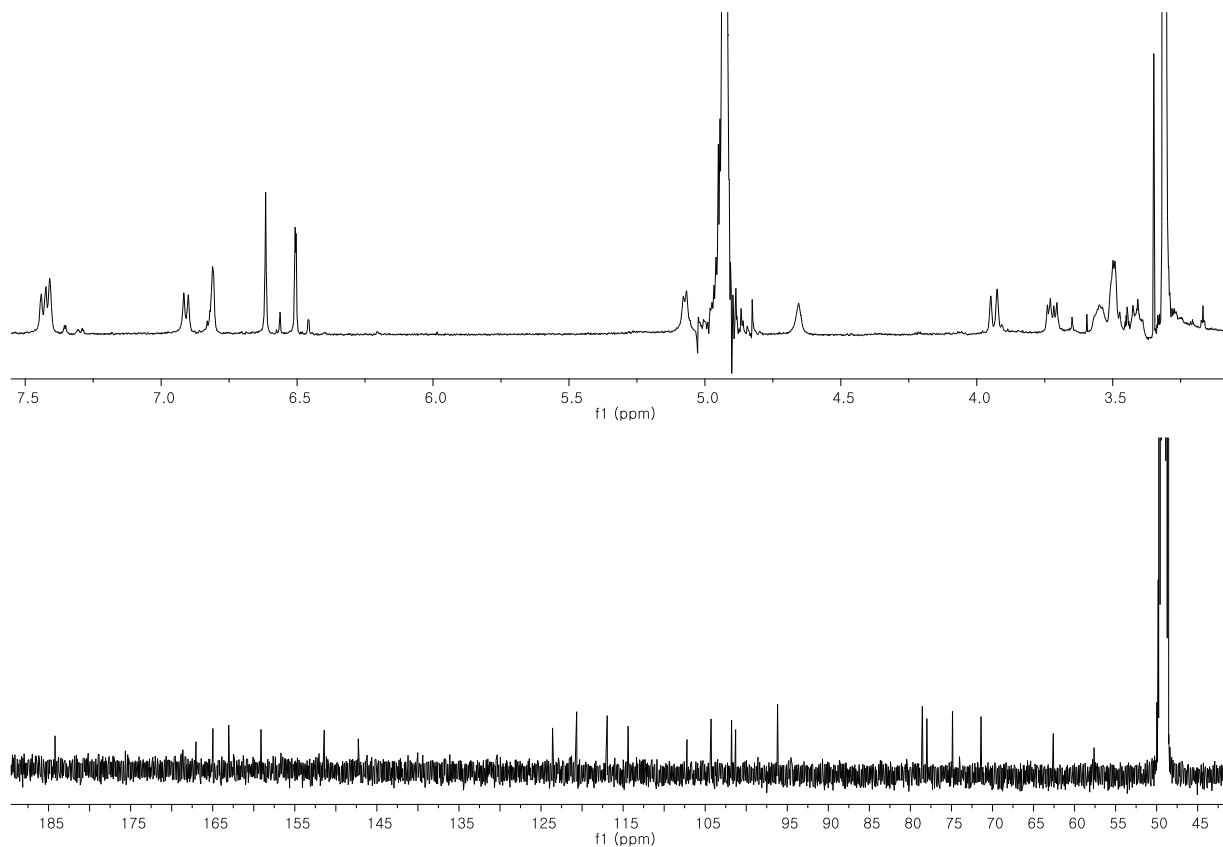


Fig. S95. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **28**

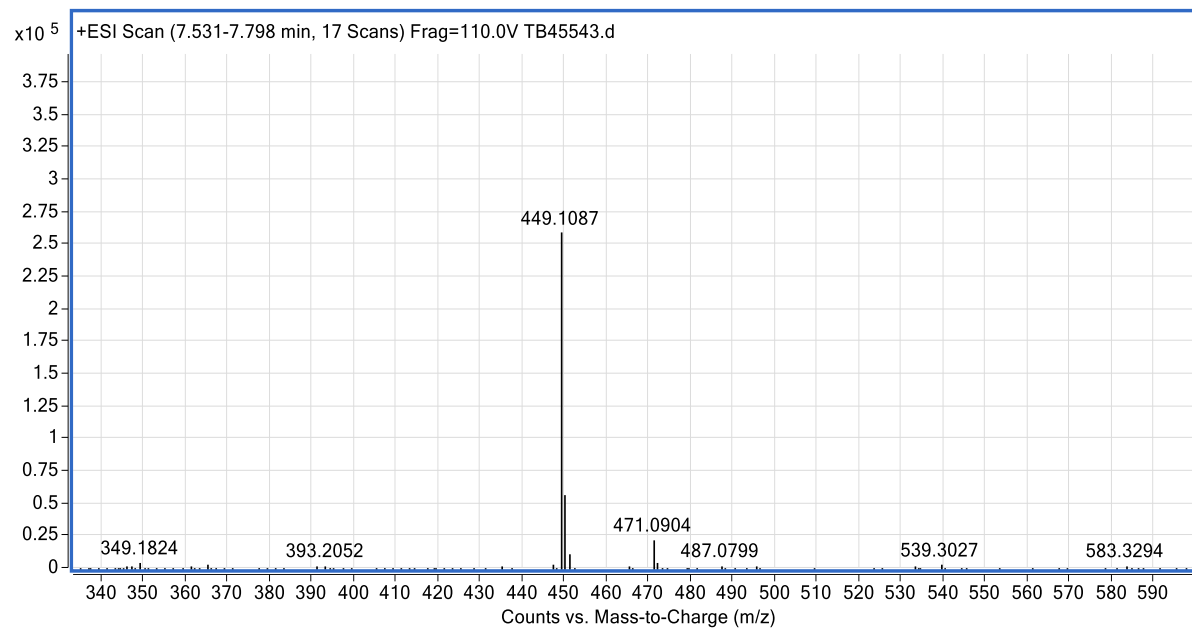


Fig. S96. MS spectrum of compound **28**

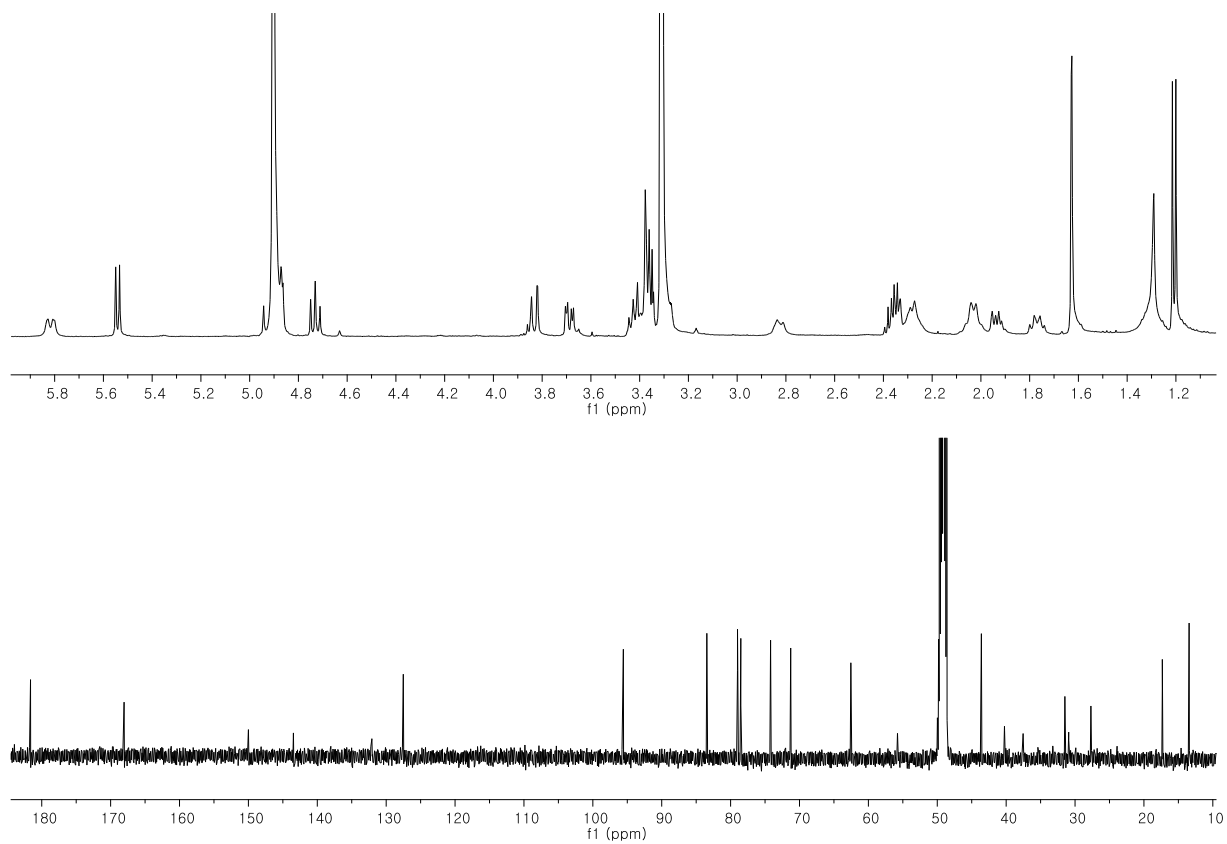


Fig. S97. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **29**

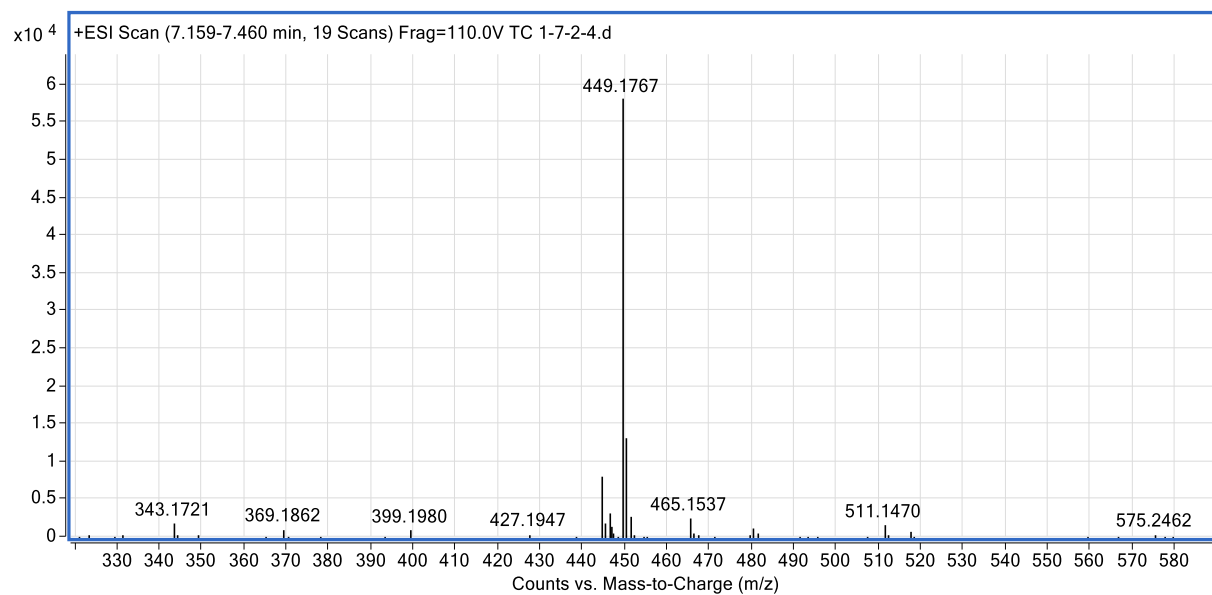


Fig. S98. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **29**

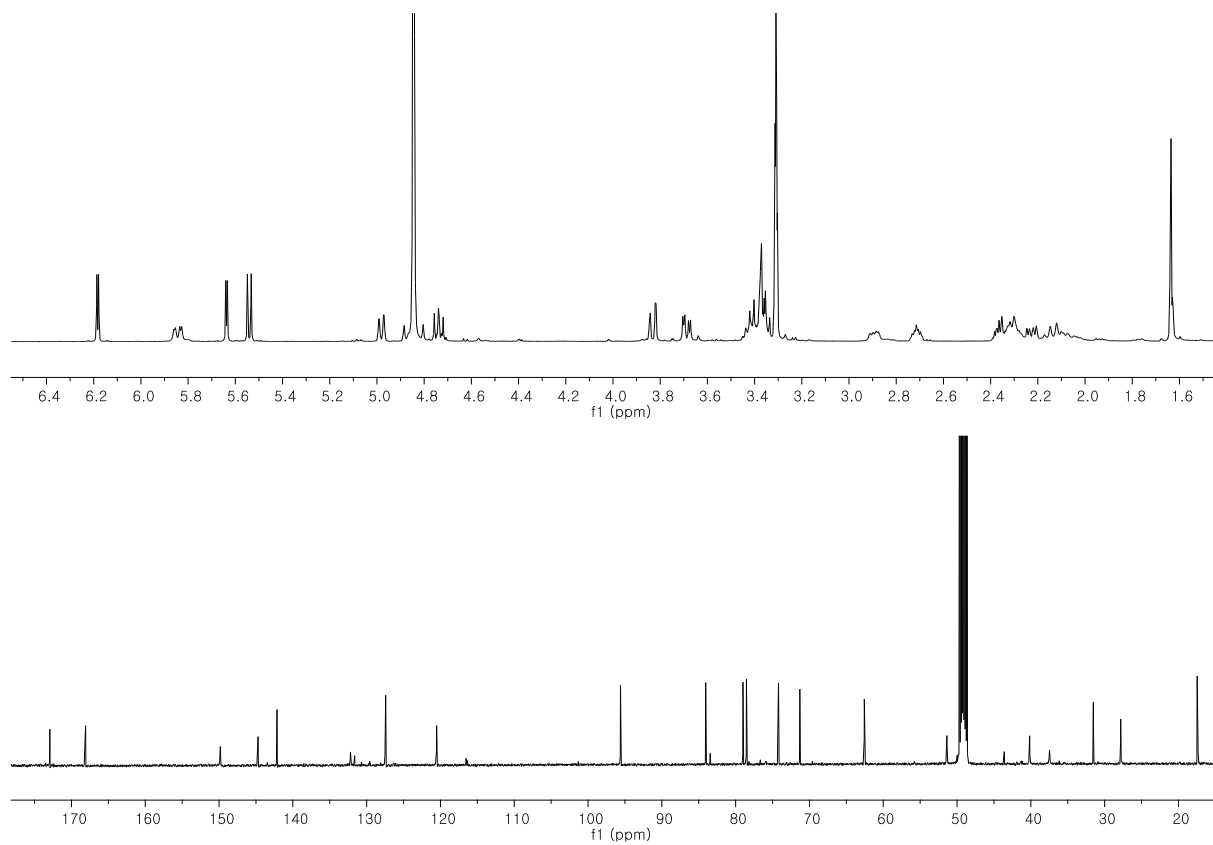


Fig. S99. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **30**

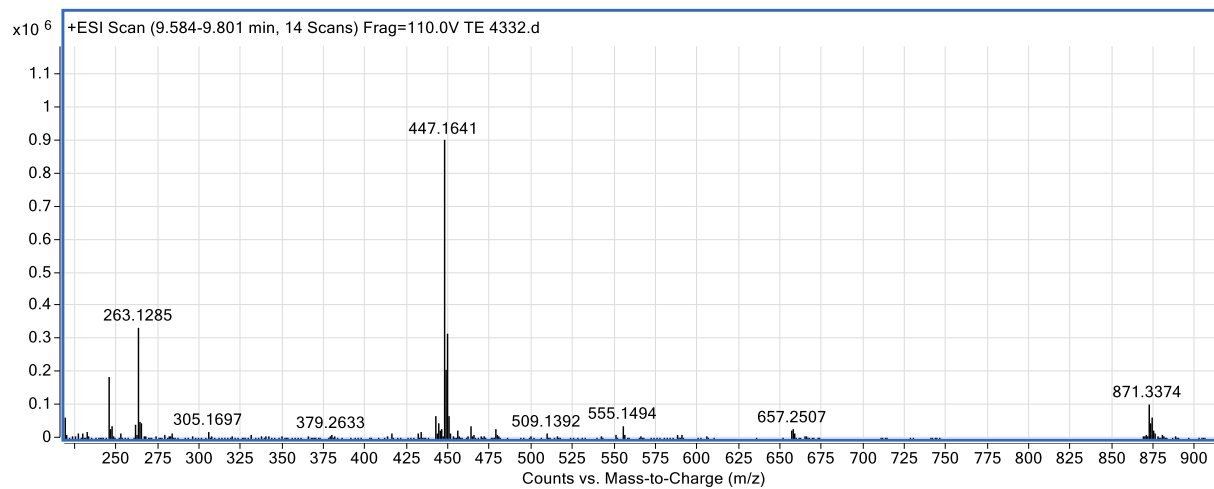


Fig. S100. MS spectrum of compound **30**

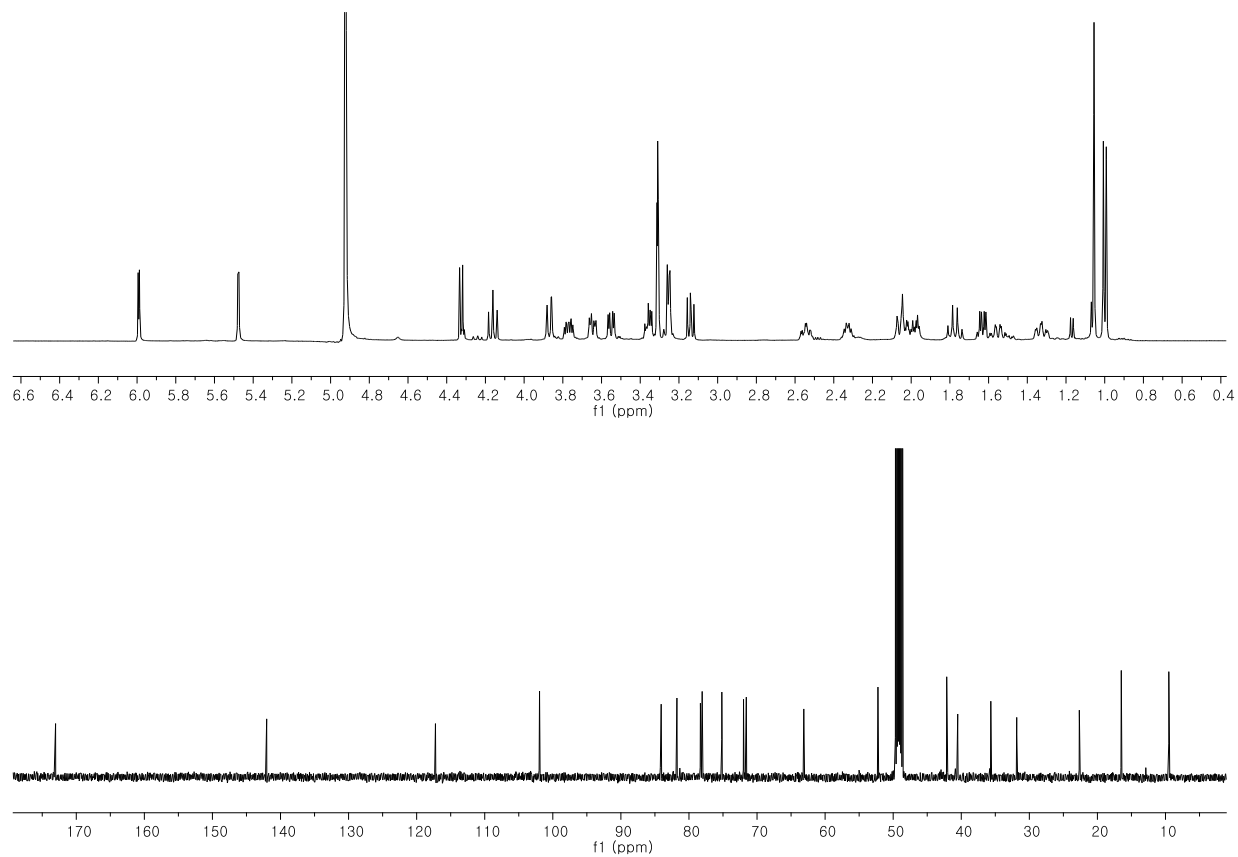


Fig. S101. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **31**

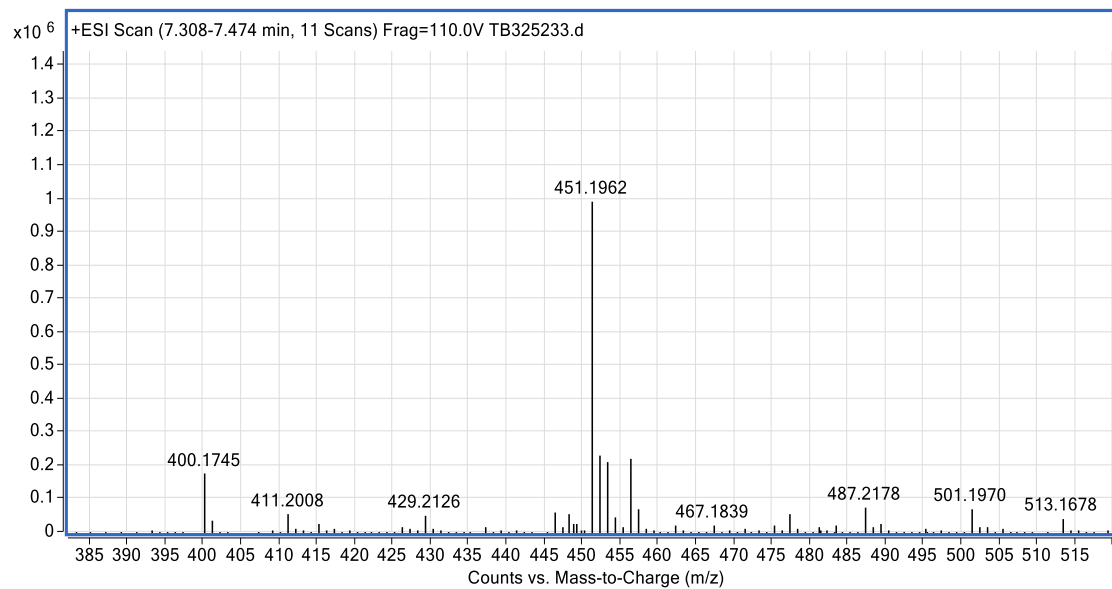


Fig. S102. MS spectrum of compound **31**

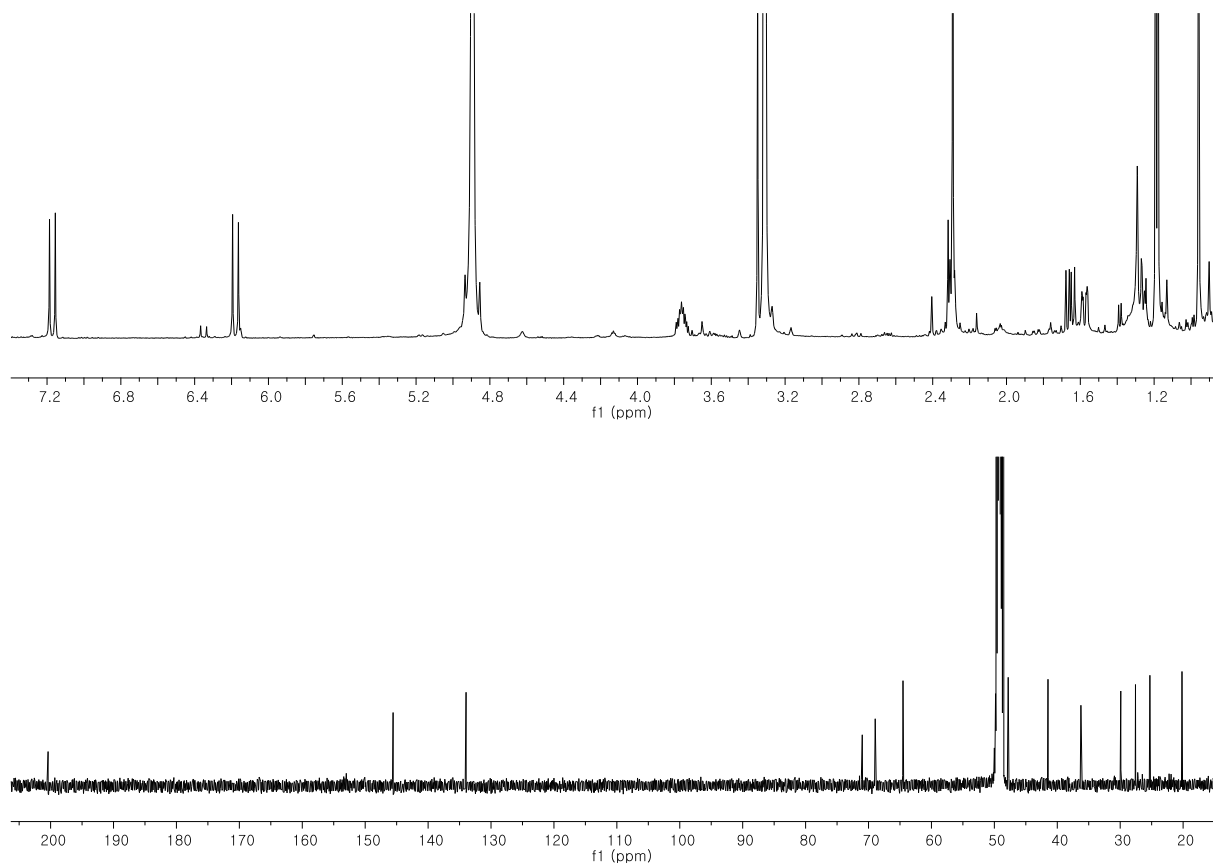


Fig. S103. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **32**

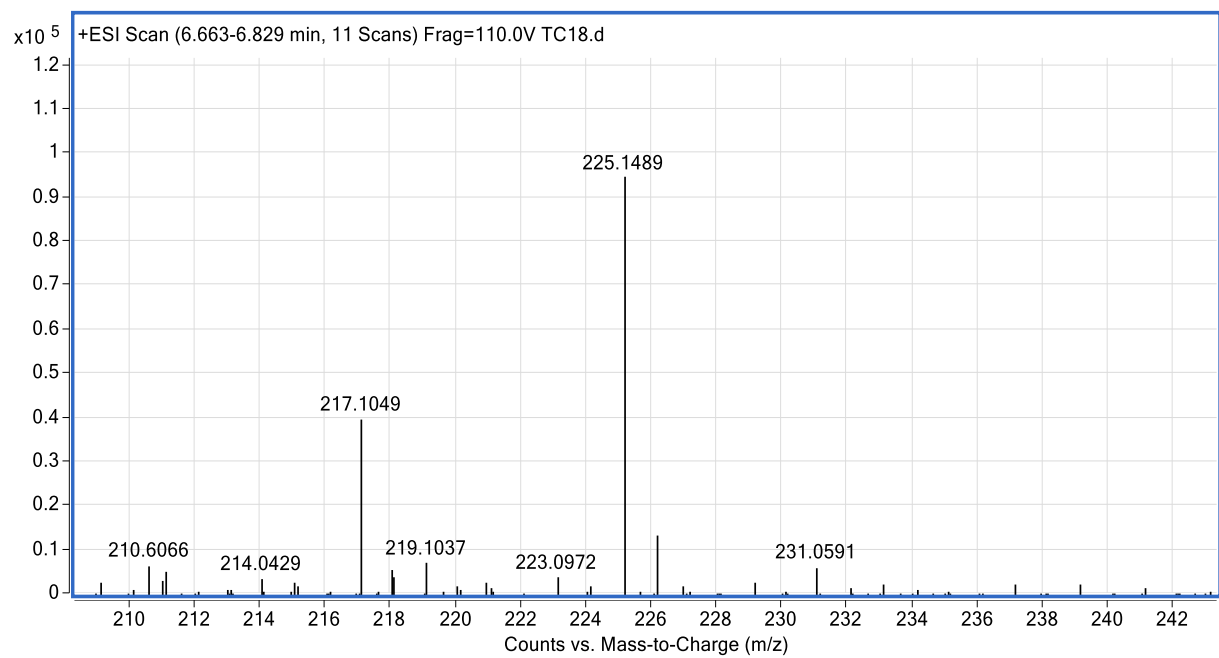


Fig. S104. MS spectrum of compound **32**

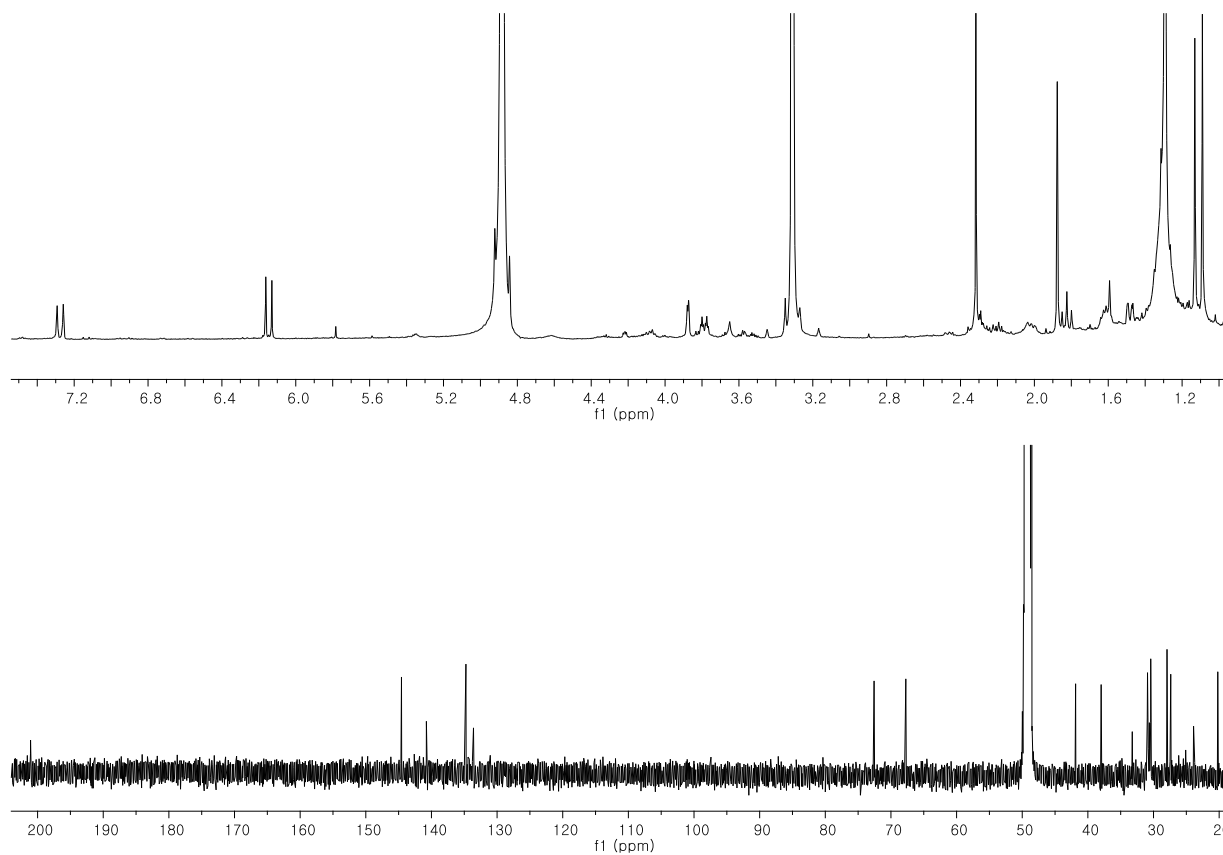


Fig. S105. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **33**

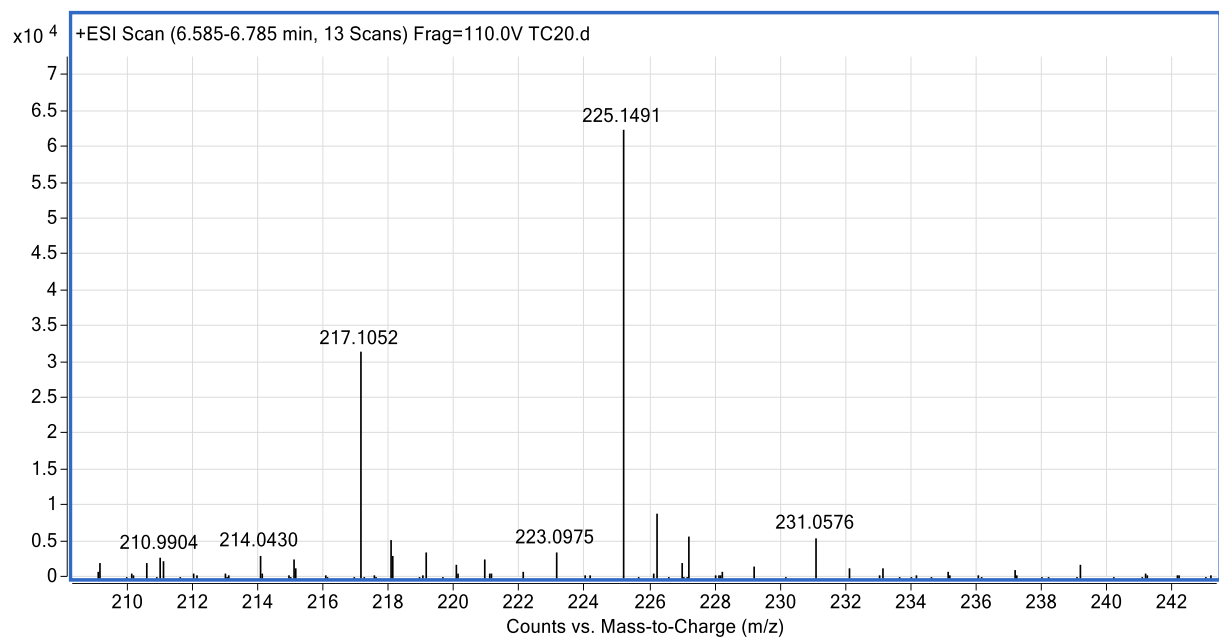


Fig. S106. MS spectrum of compound **33**

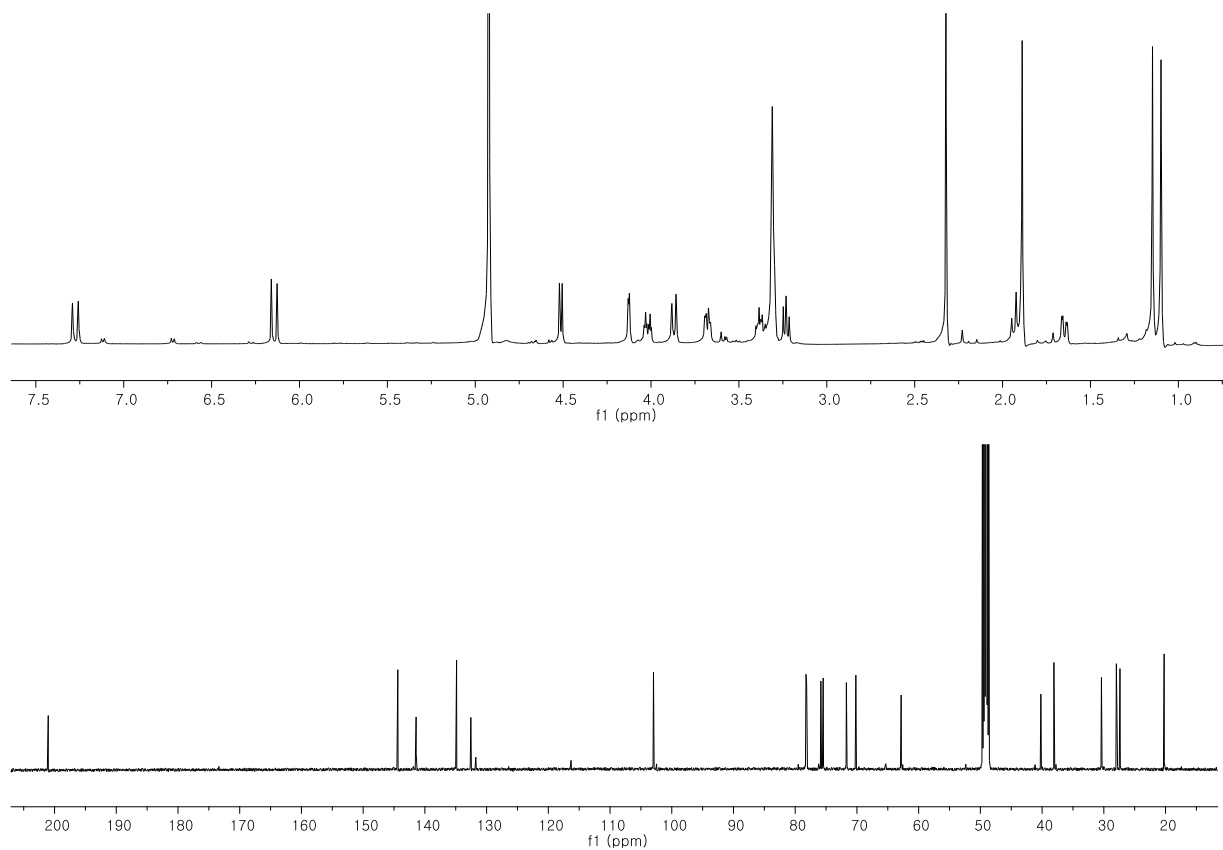


Fig. S107. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **34**

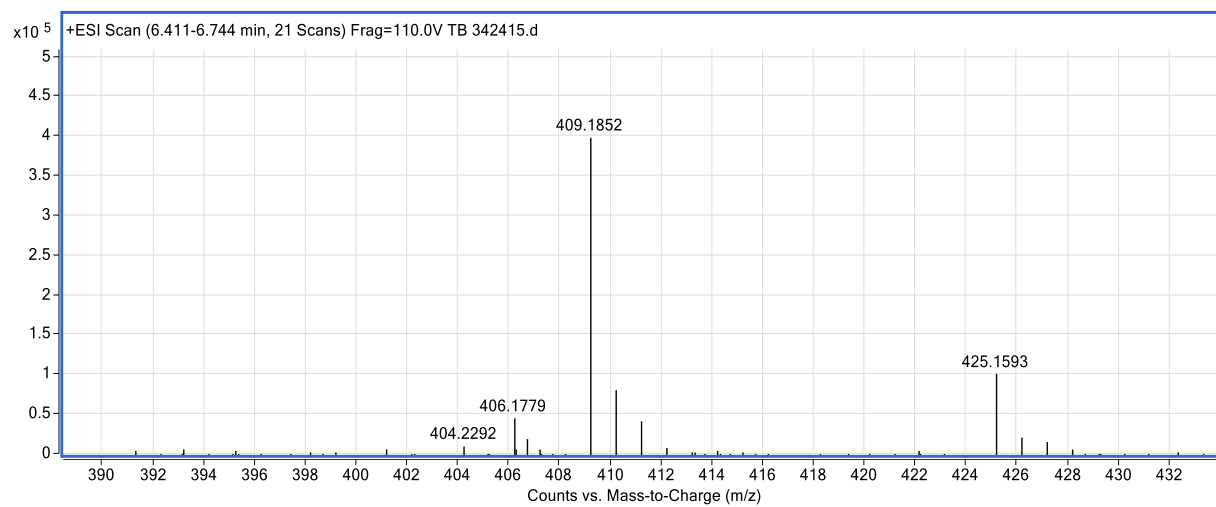


Fig. S108. MS spectrum of compound **34**

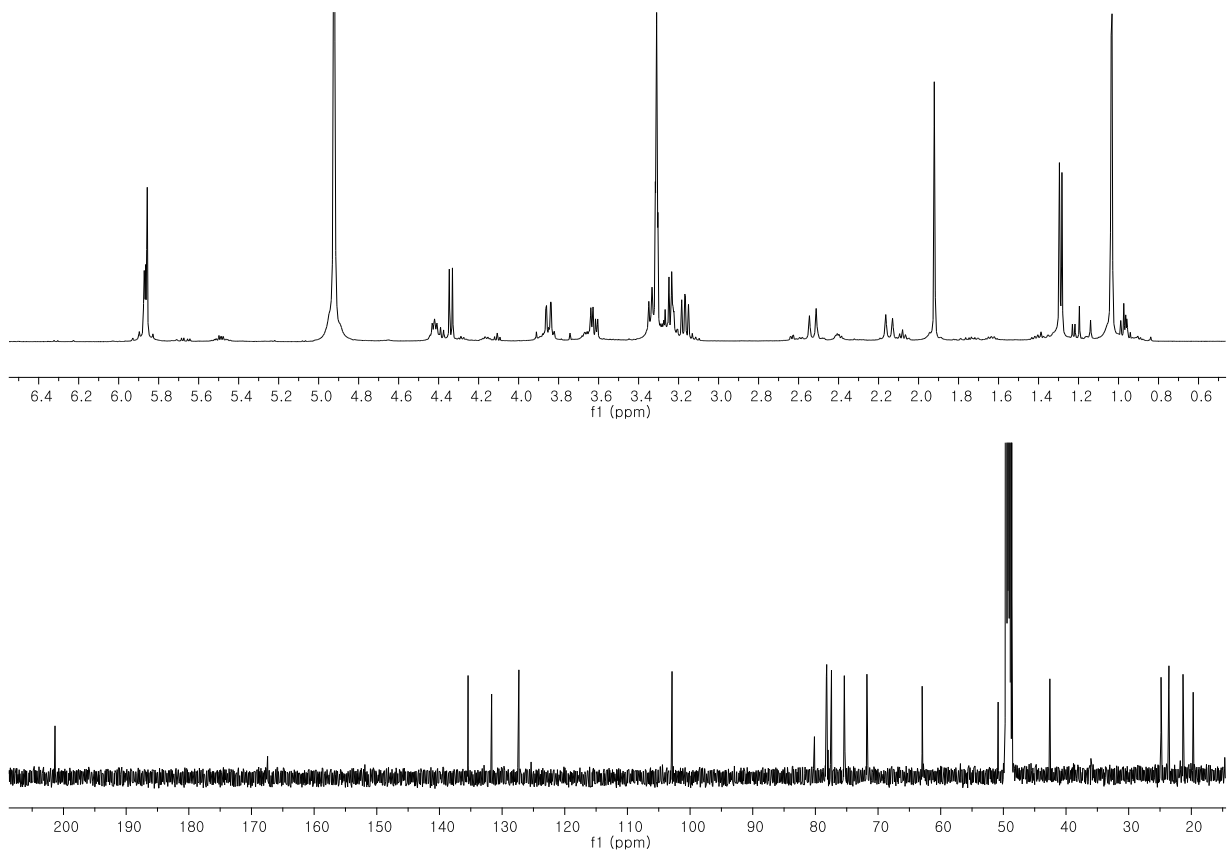


Fig. S109. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **35**

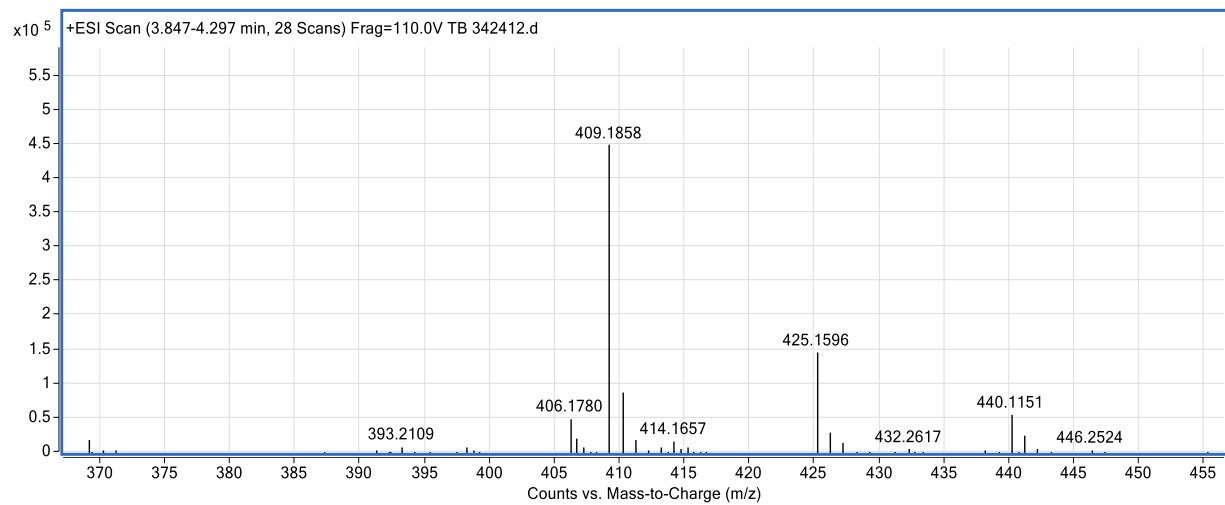


Fig. S110. MS spectrum of compound **35**

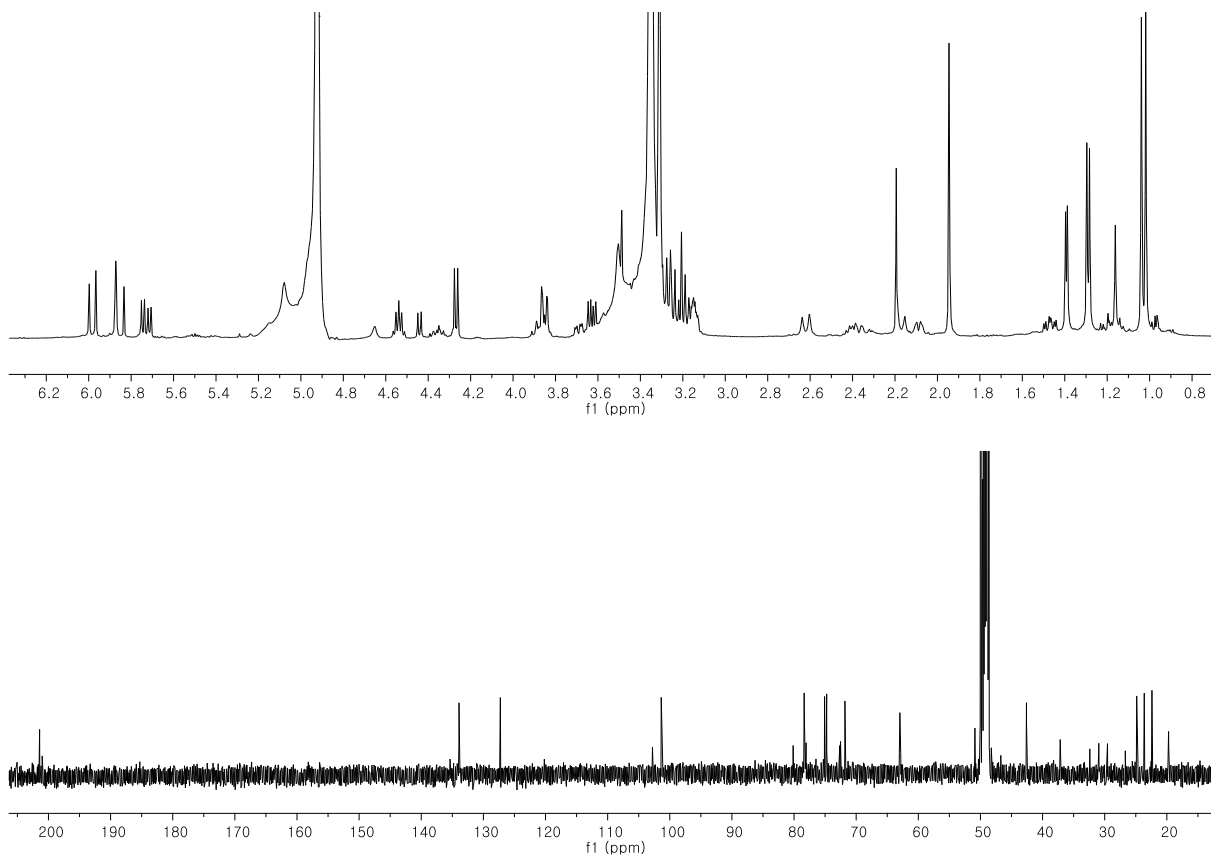


Fig. S111. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **36**

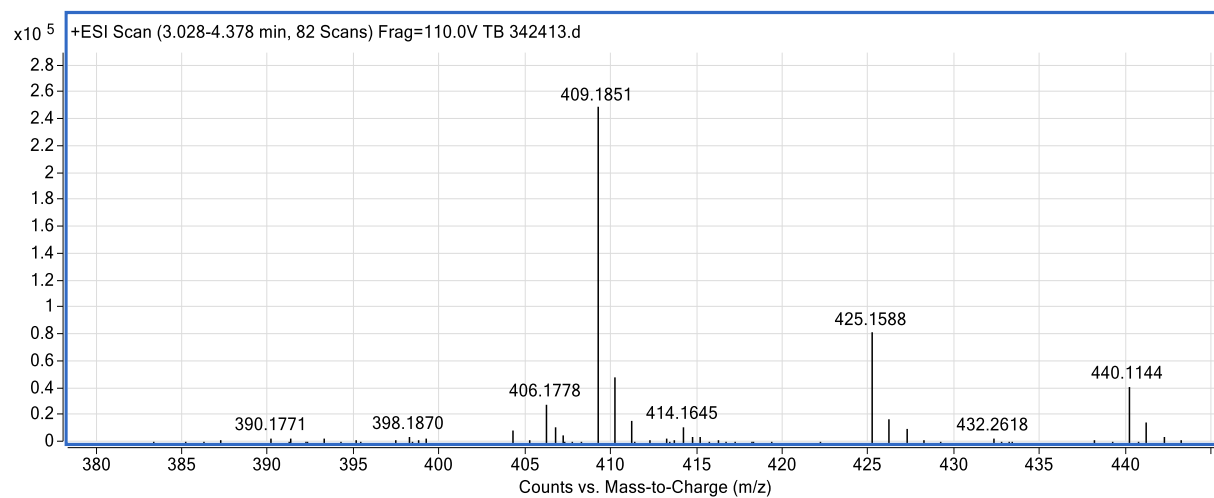


Fig. S112. MS spectrum of compound **36**

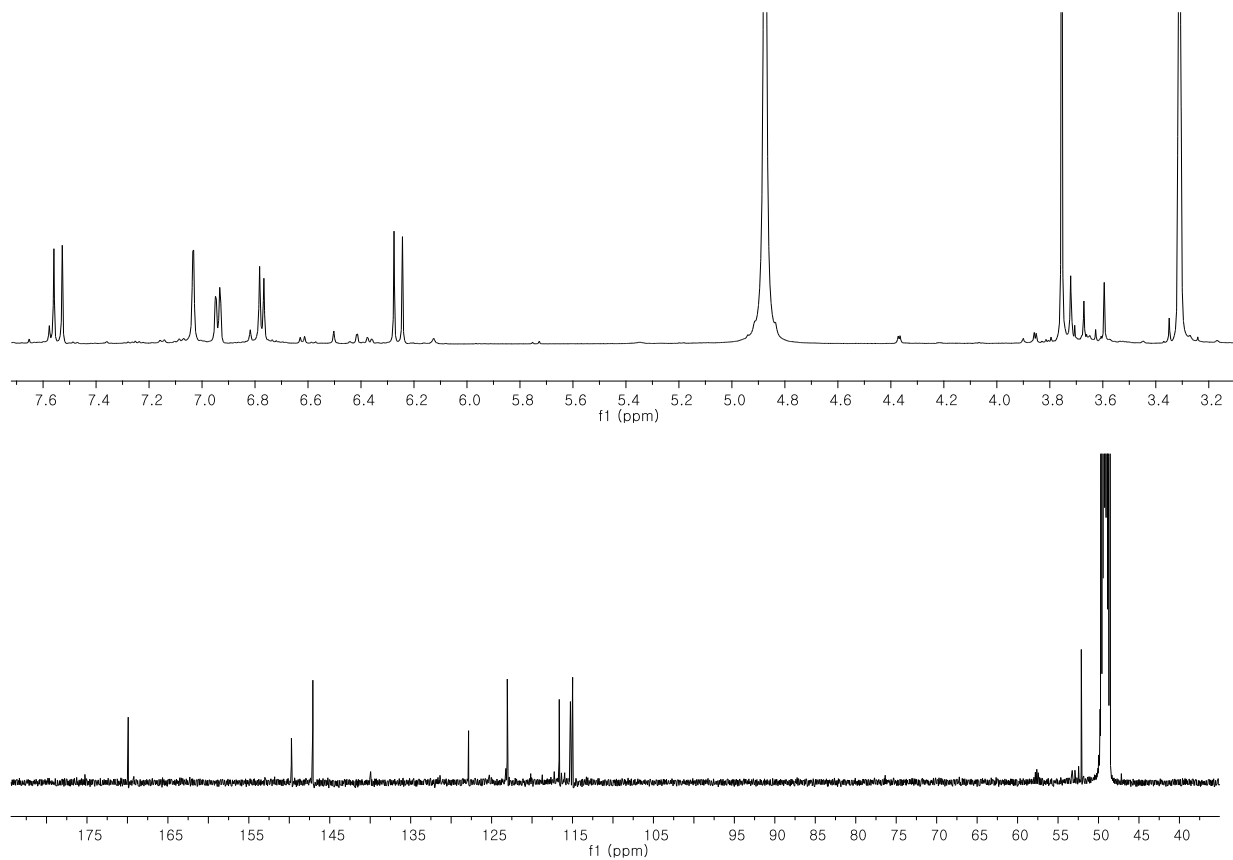


Fig. S113. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **37**

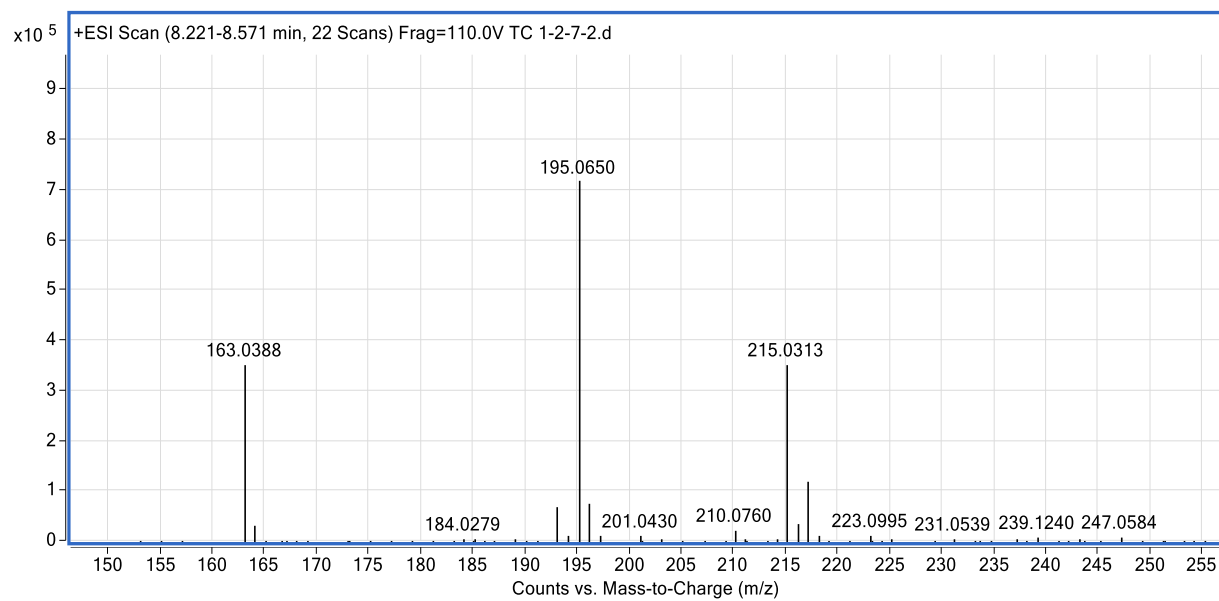


Fig. S114. MS spectrum of compound **37**

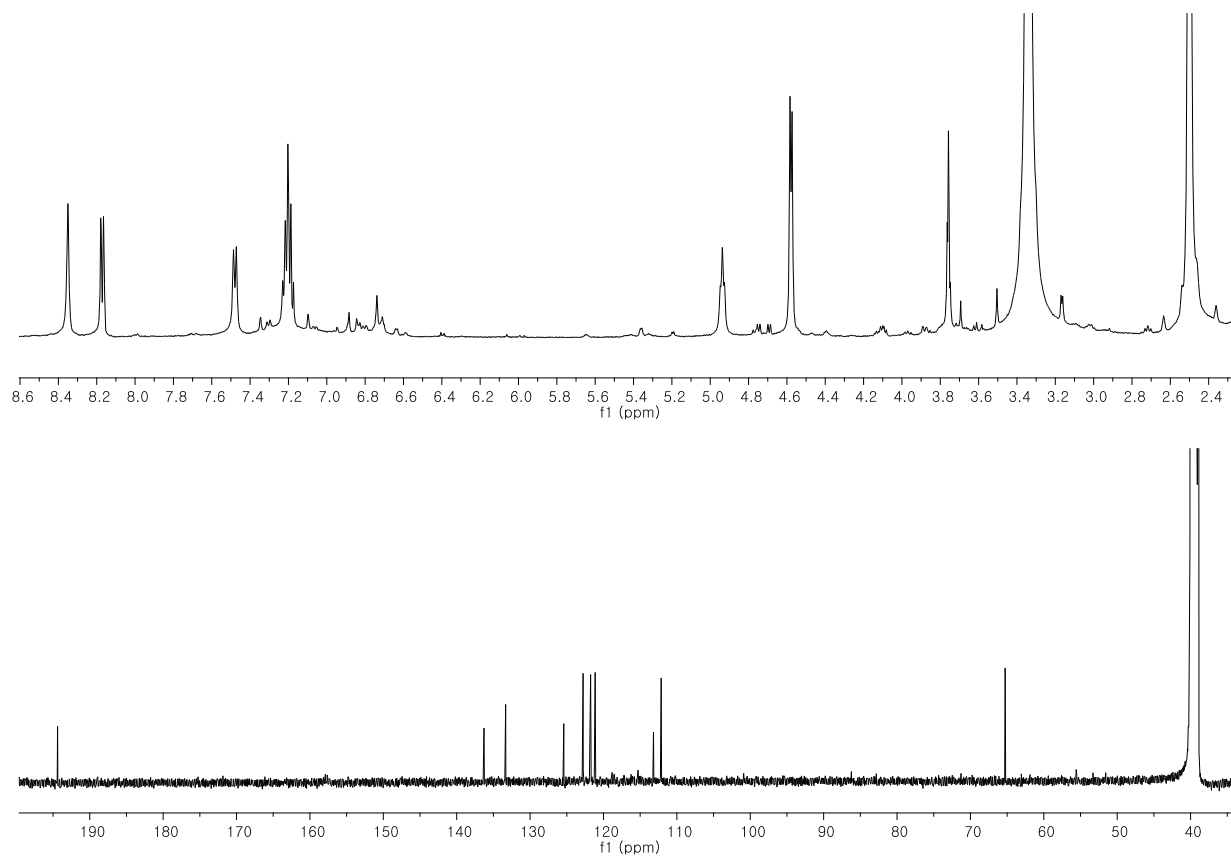


Fig. S115. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **38**

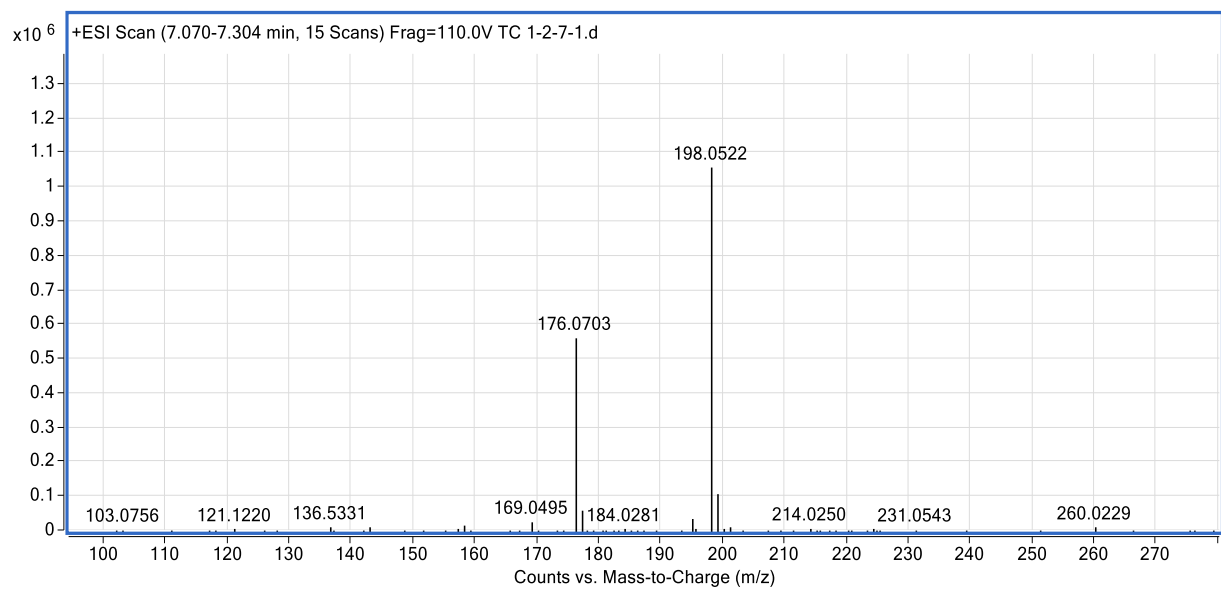


Fig. S116. MS spectrum of compound **38**

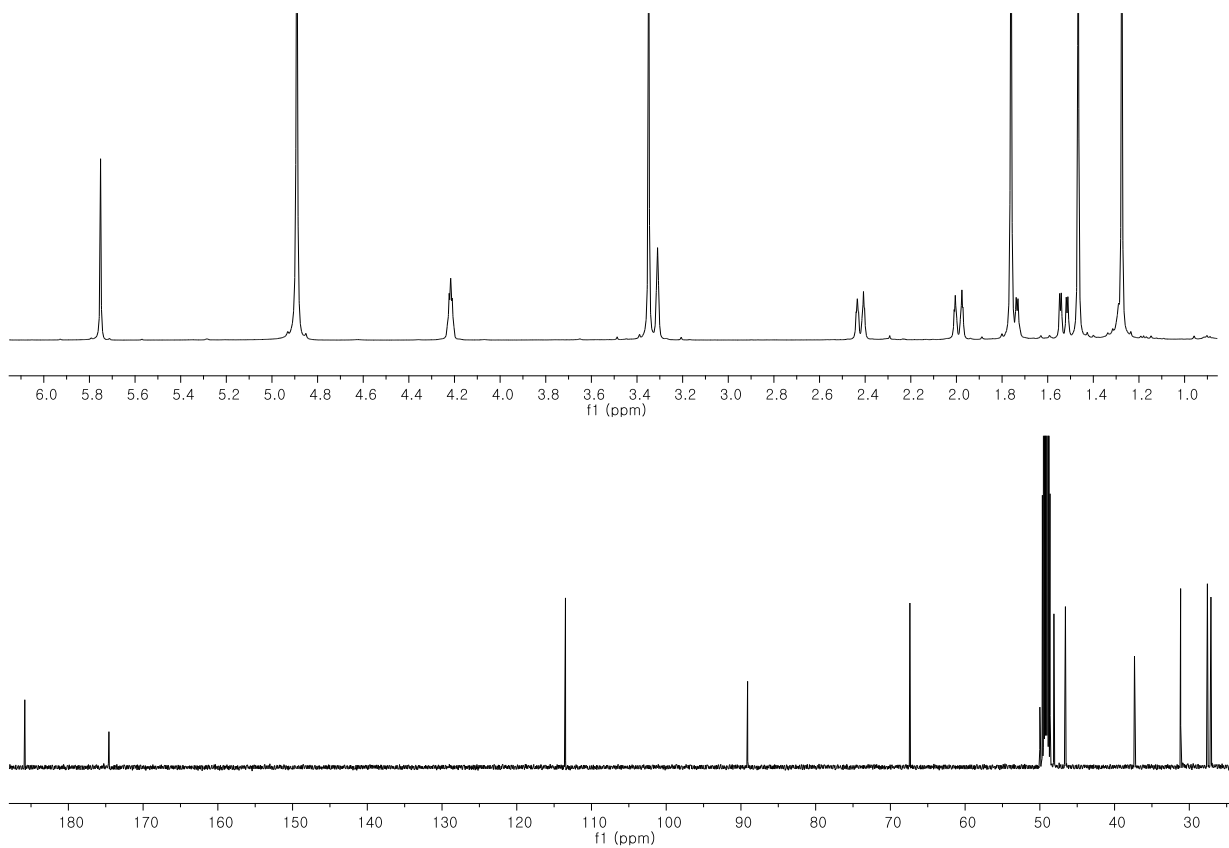


Fig. S117. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **39**

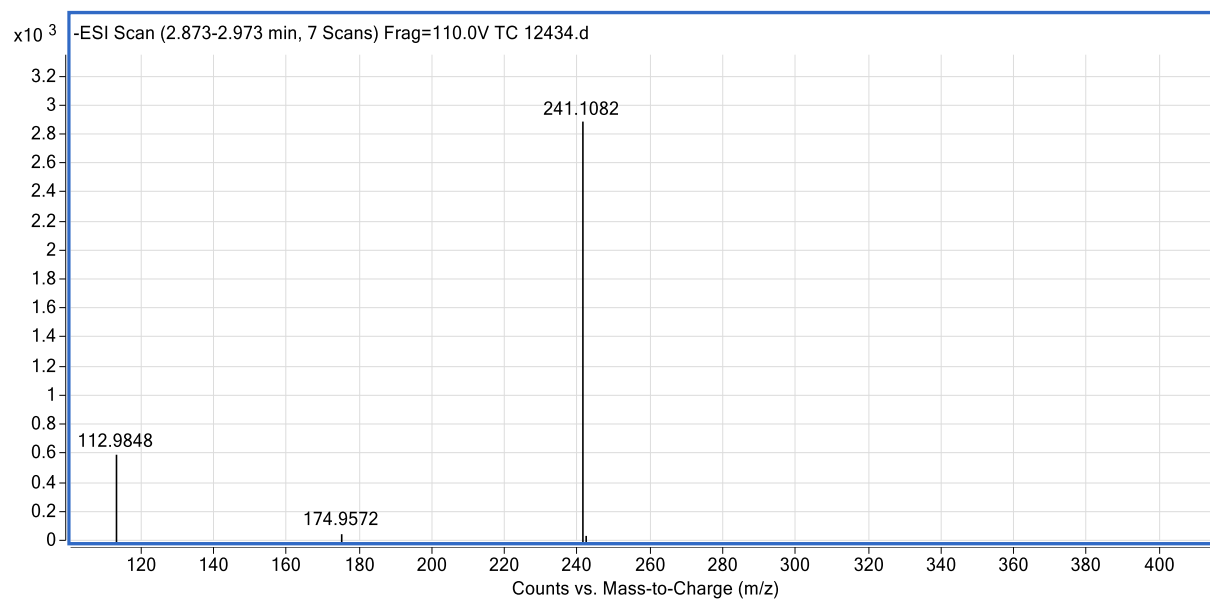


Fig. S118. MS spectrum of compound **39**

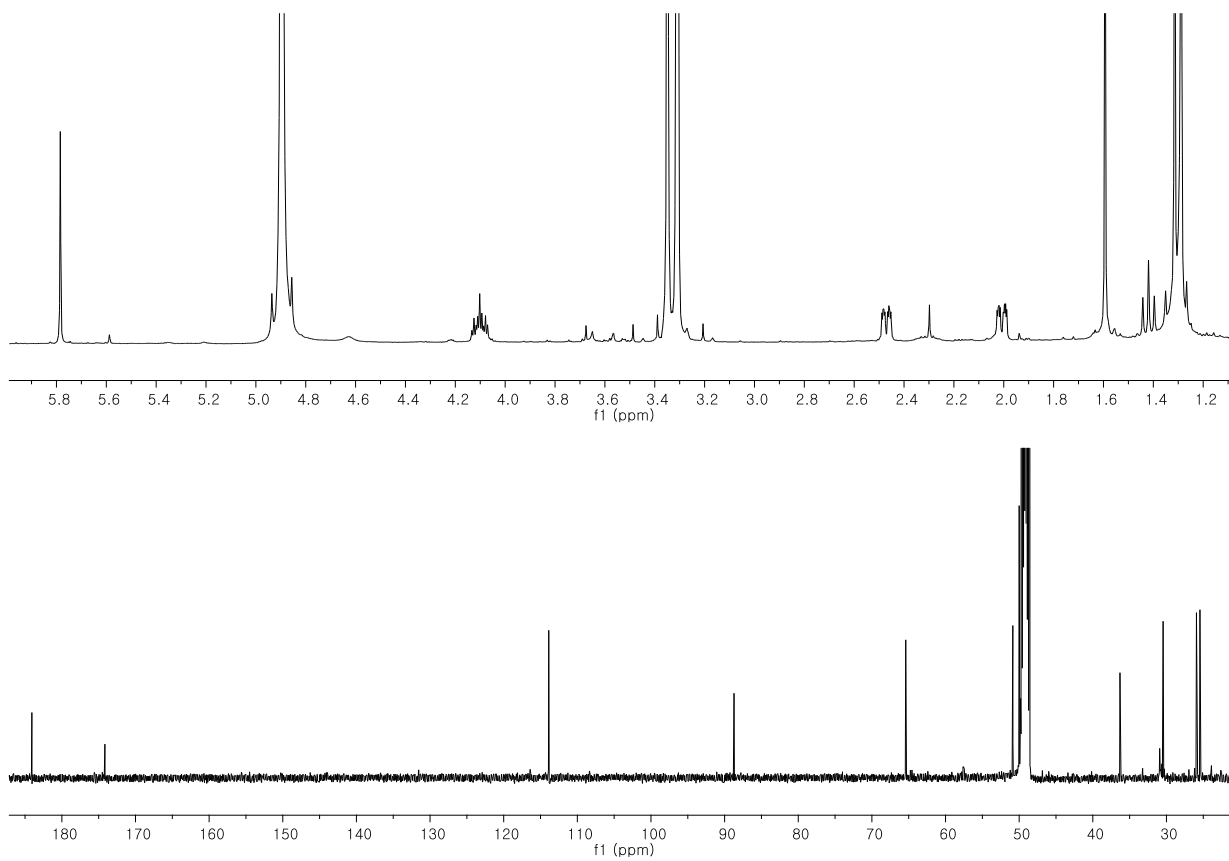


Fig. S119. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **40**

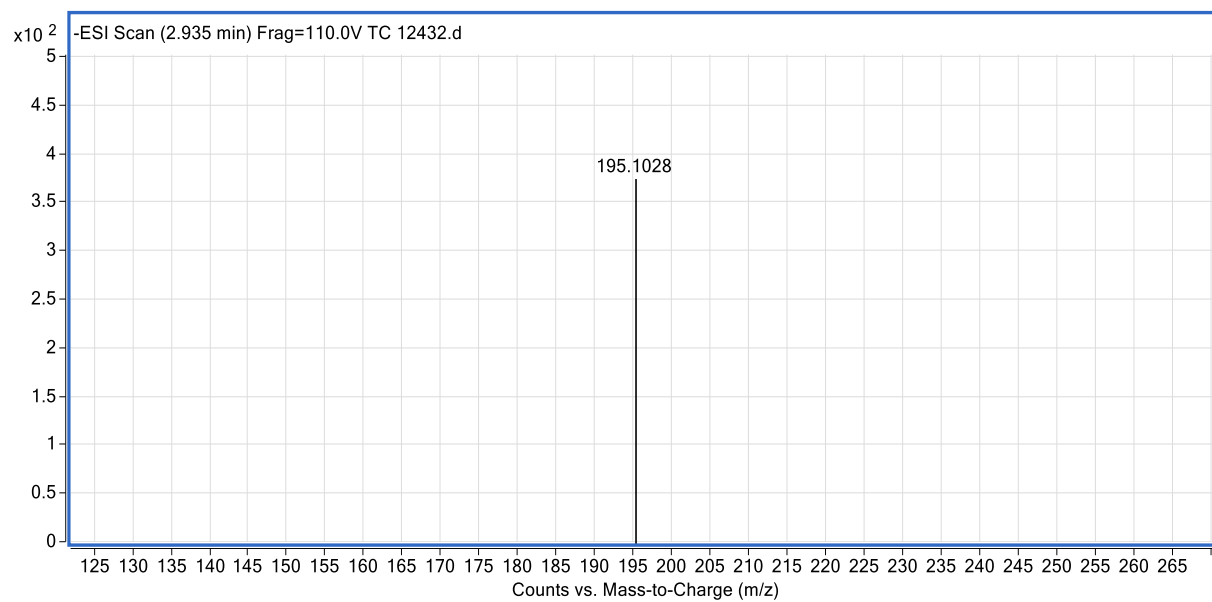


Fig. S120. MS spectrum of compound **40**

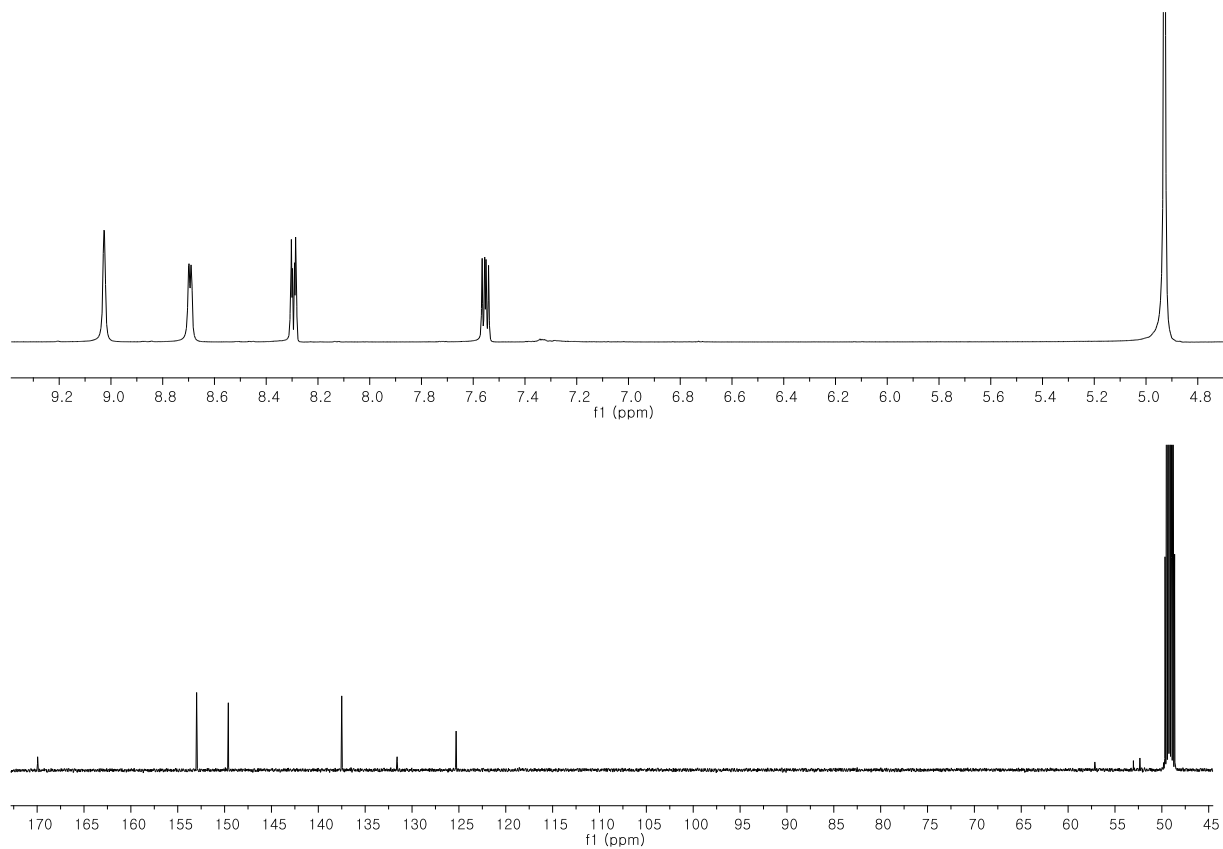


Fig. S121. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **41**

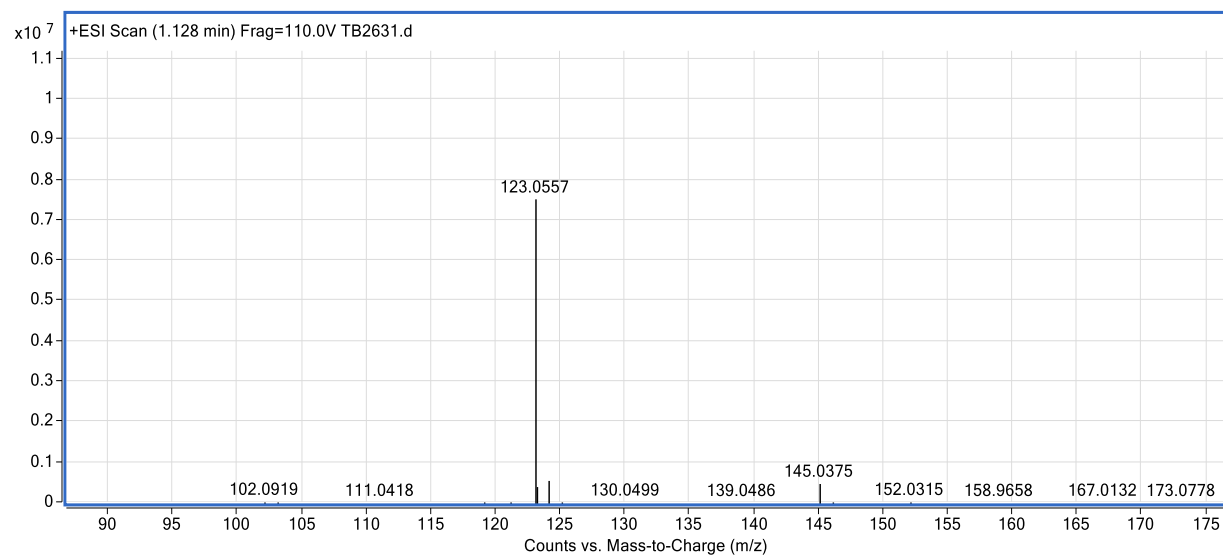


Fig. S122. MS spectrum of compound **41**

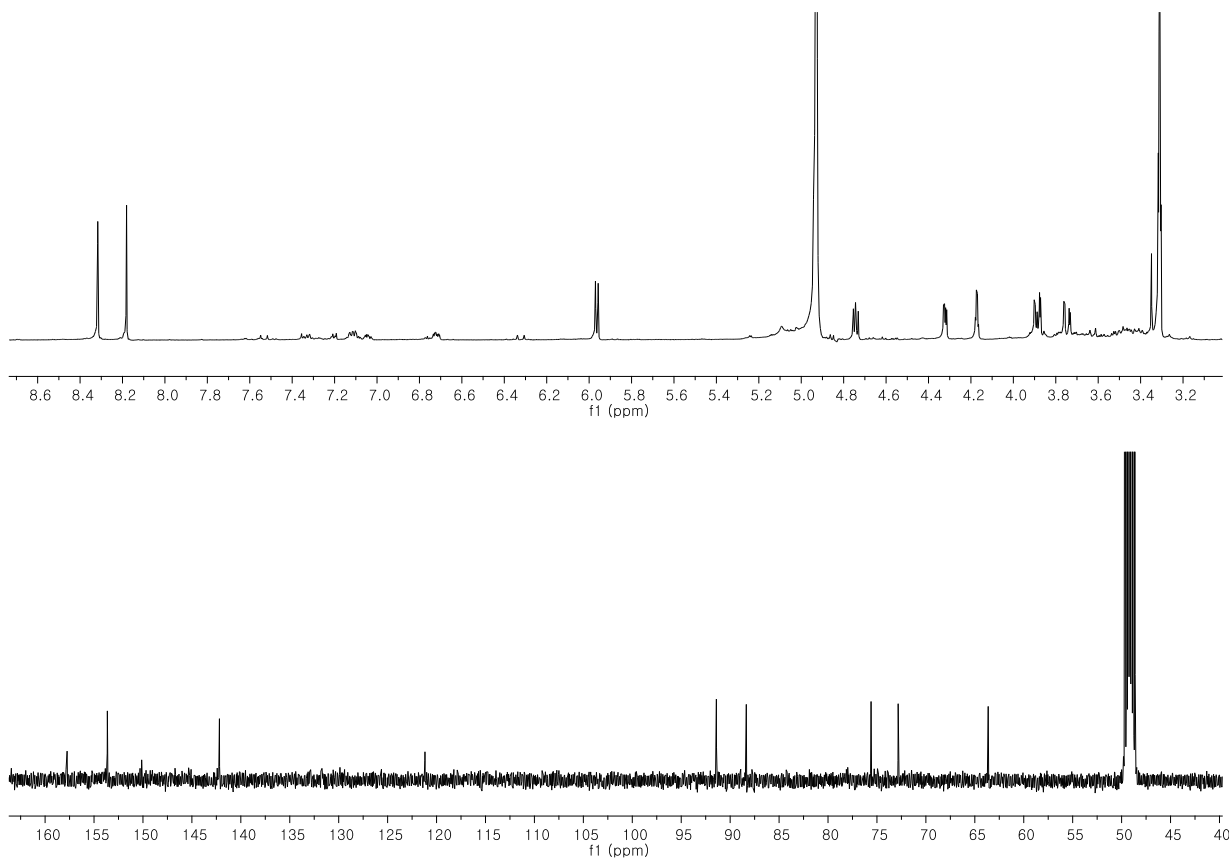


Fig. S123. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **42**

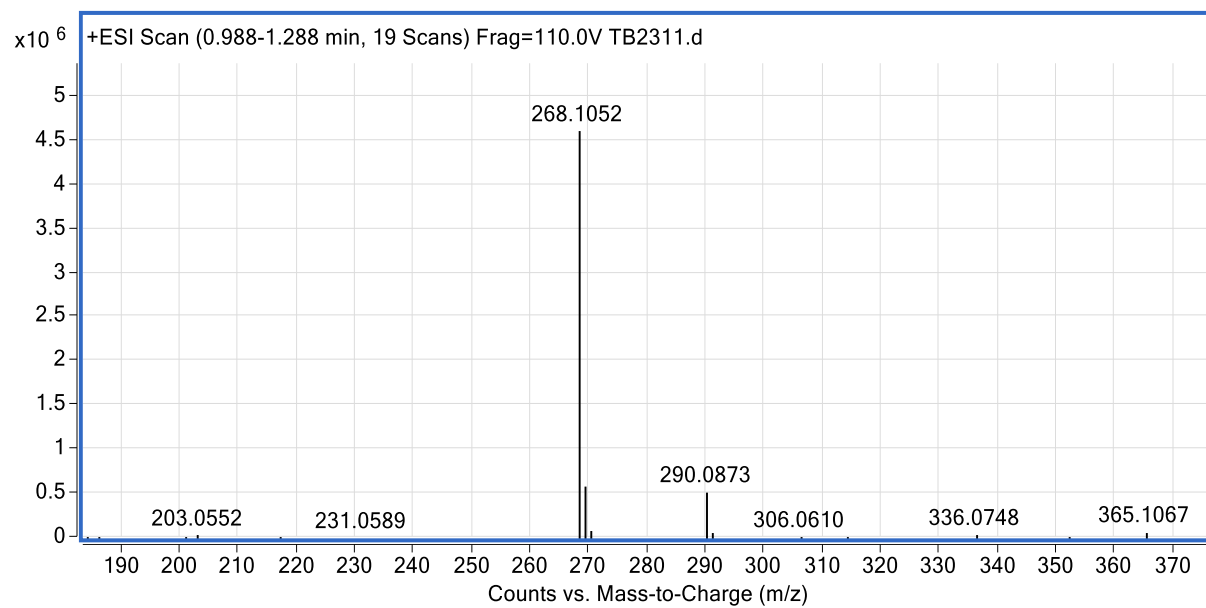


Fig. S124. MS spectrum of compound **42**

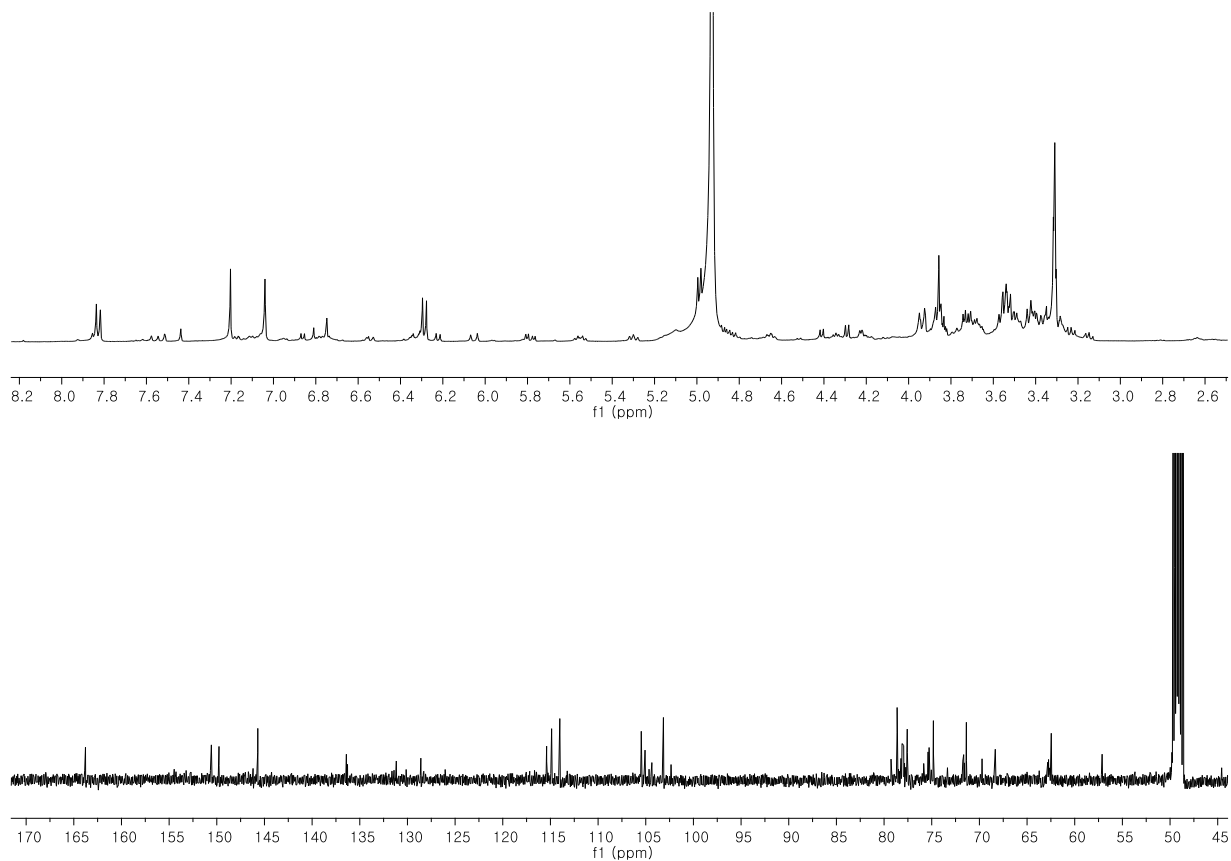


Fig. S125. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **43**

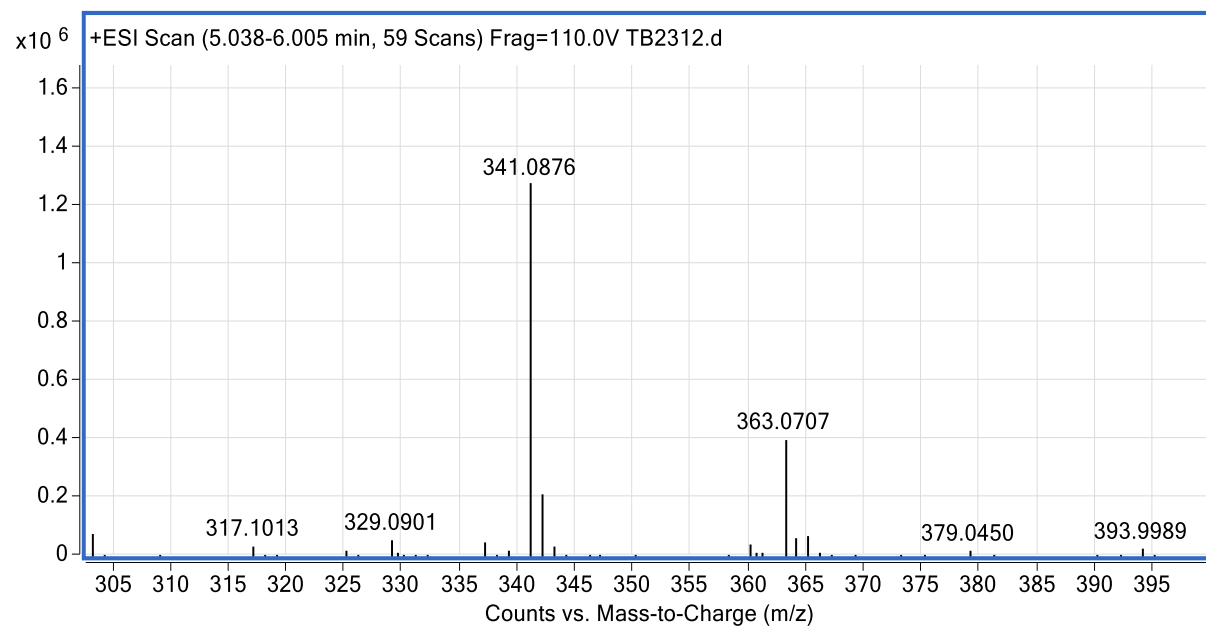


Fig. S126. MS spectrum of compound **43**

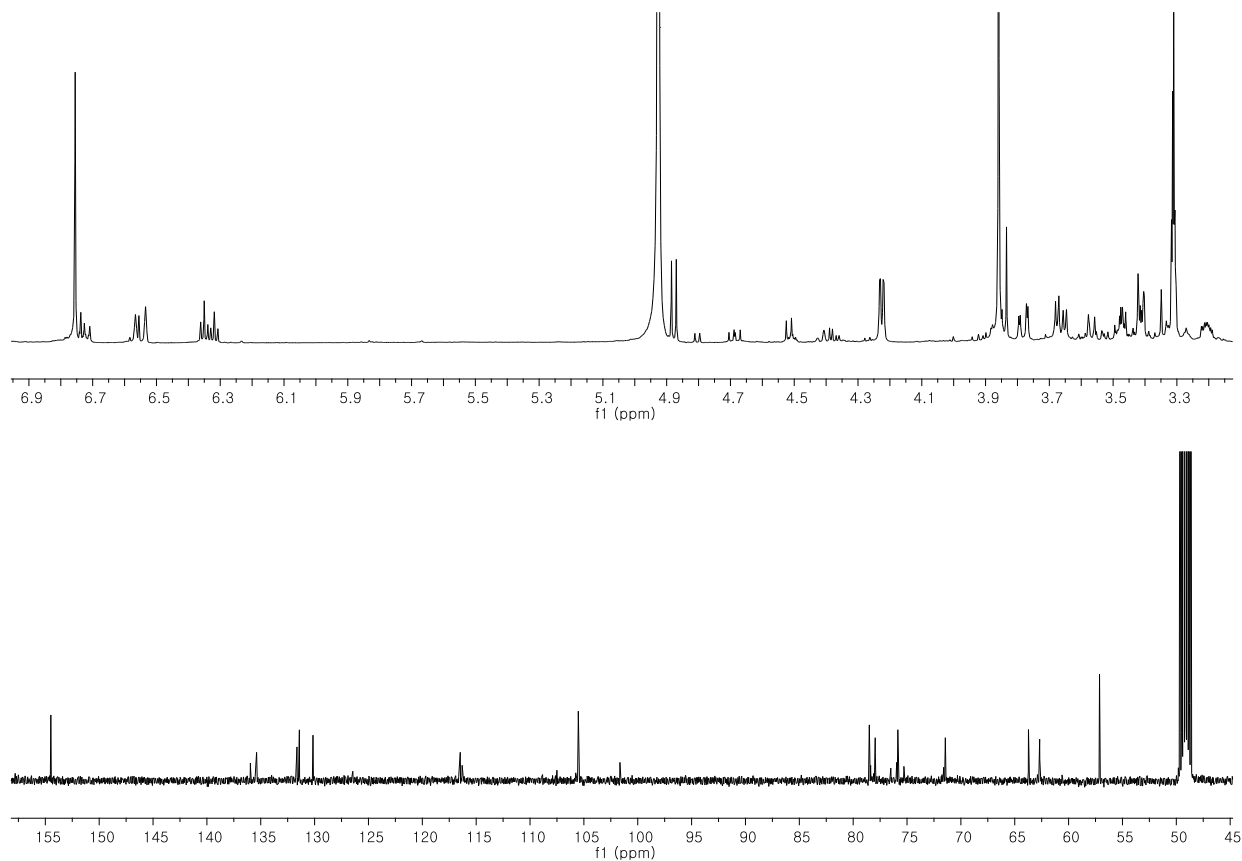


Fig. S127. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **44**

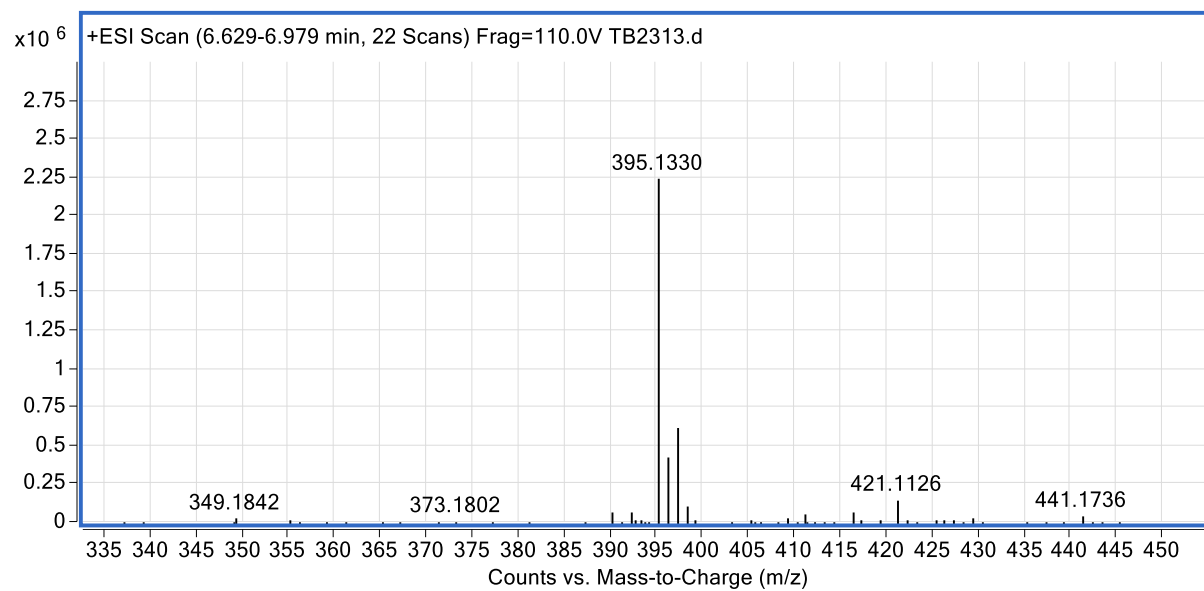


Fig. S128. MS spectrum of compound **44**

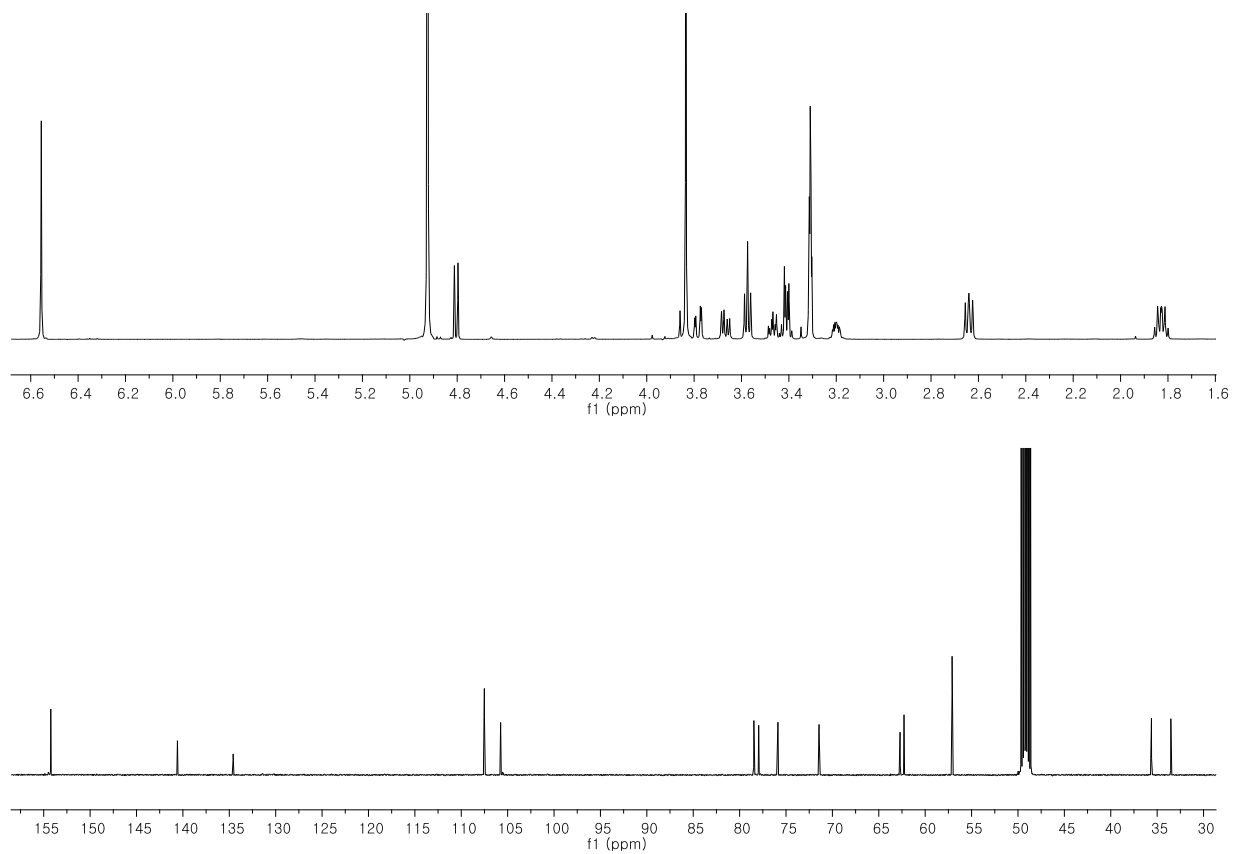


Fig. S129. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **45**

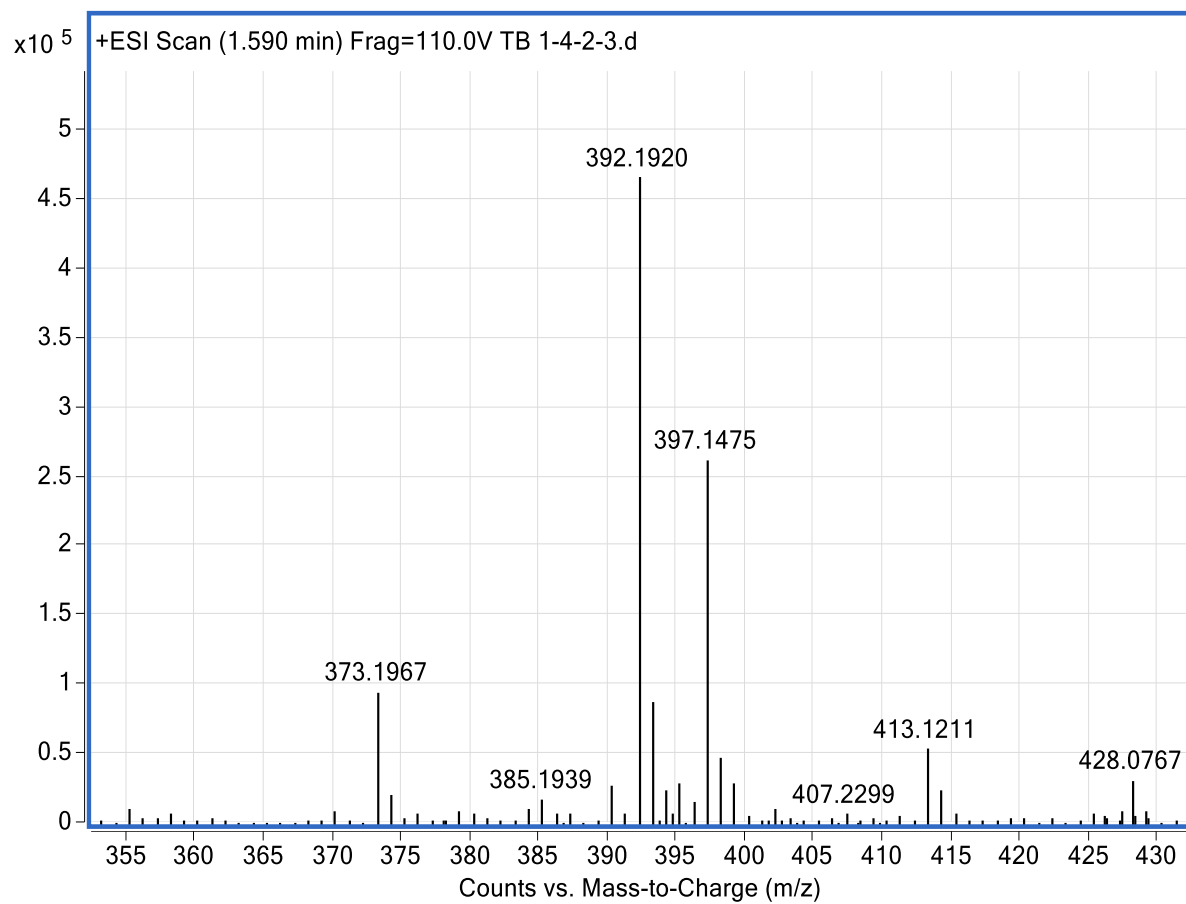


Fig. S130. MS spectrum of compound **45**

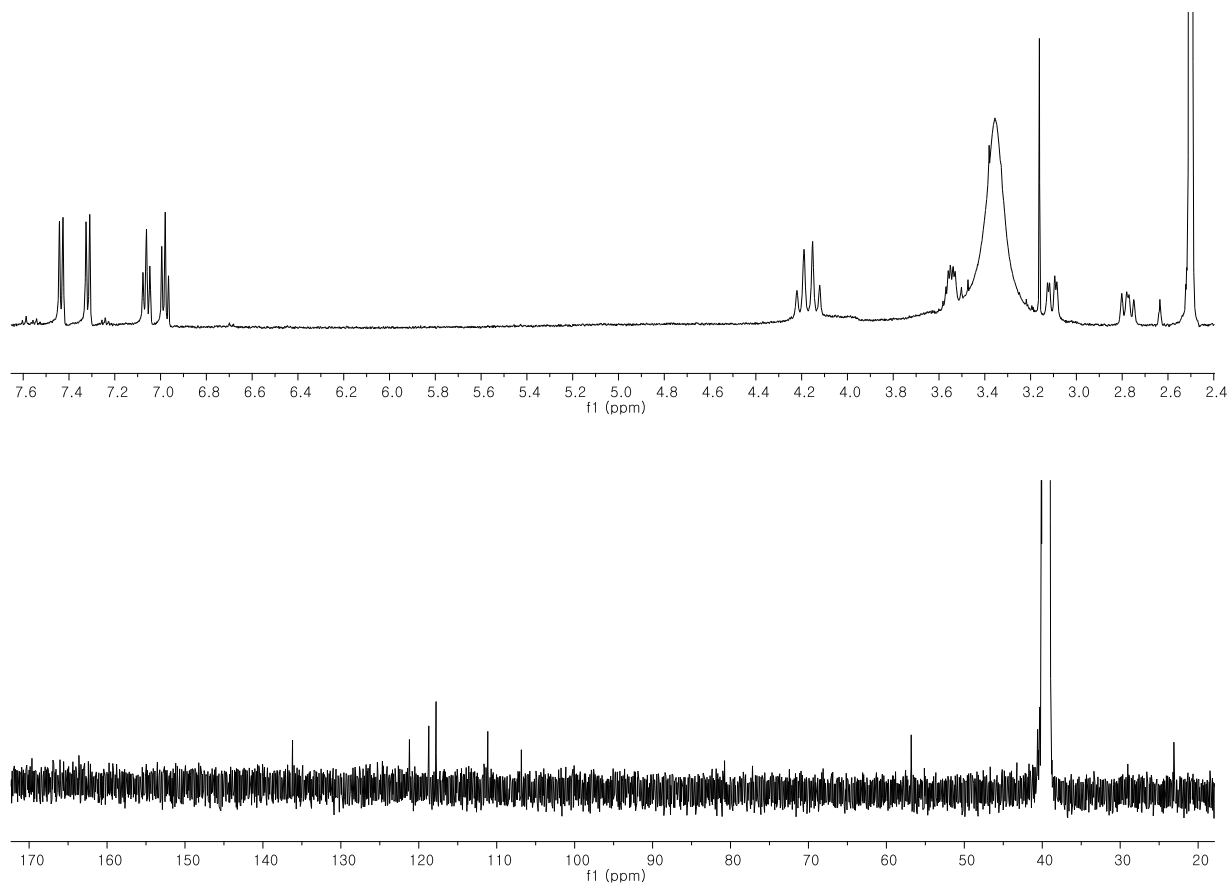


Fig. S131. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **46**

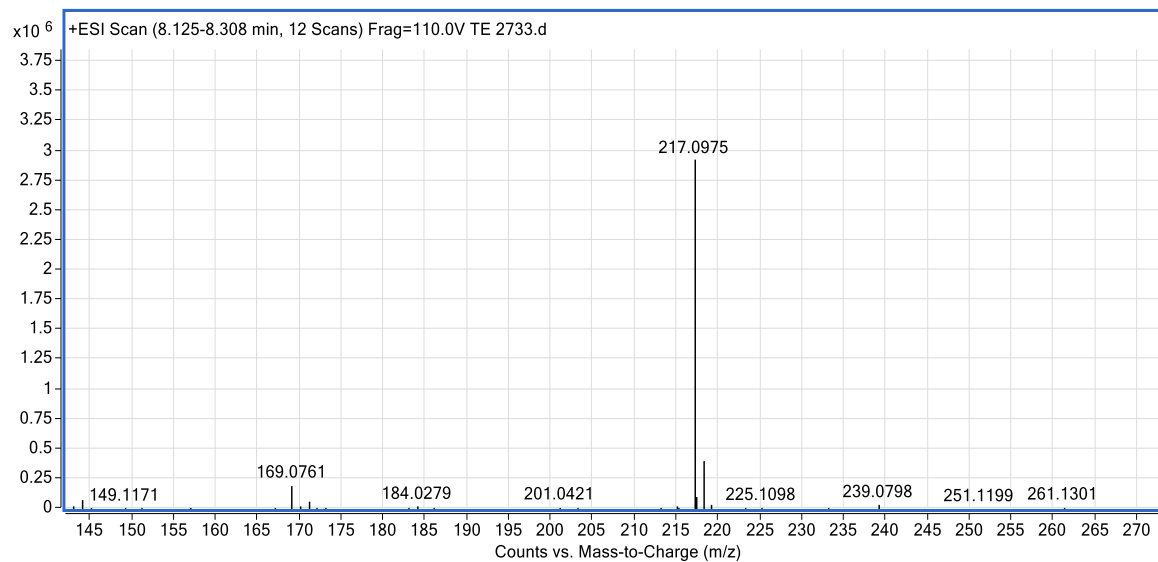


Fig. S132. MS spectrum of compound **46**

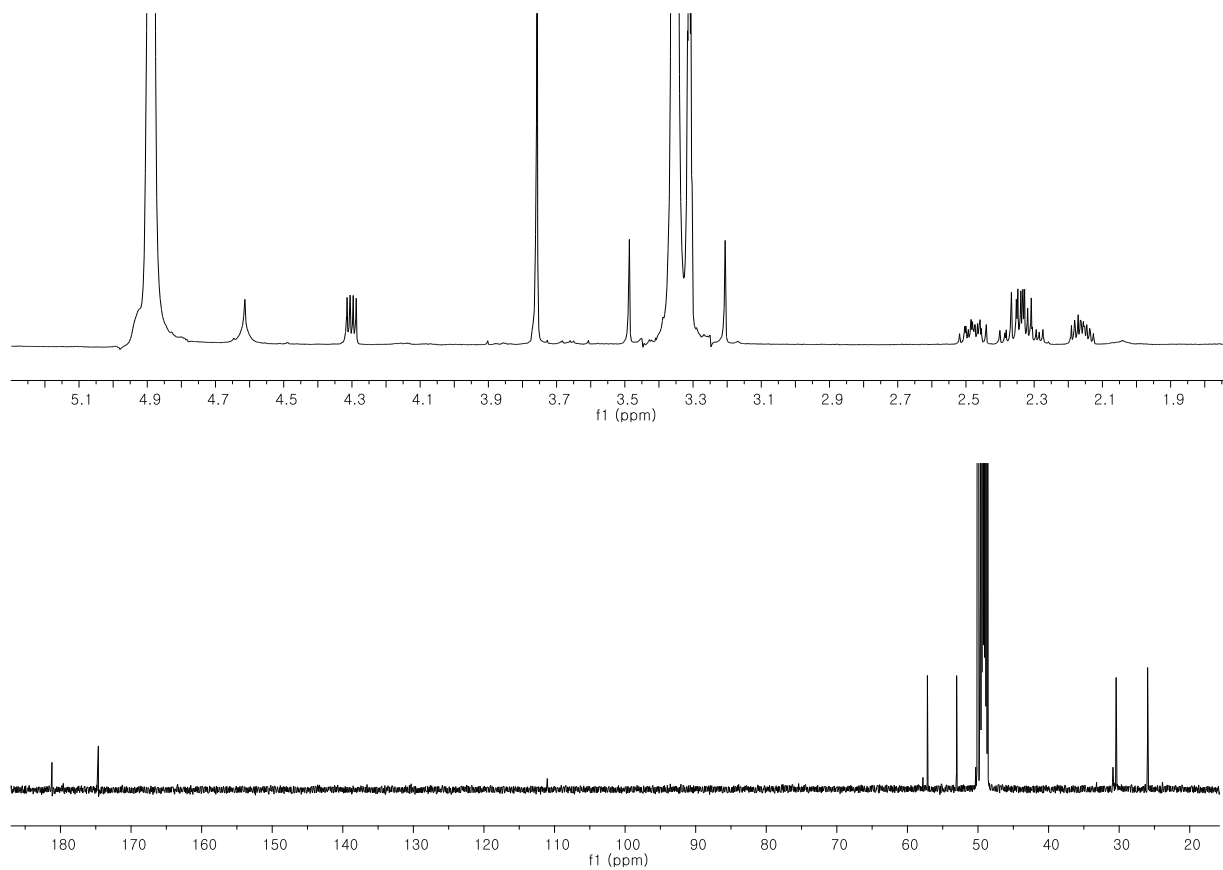


Fig. S133. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **47**

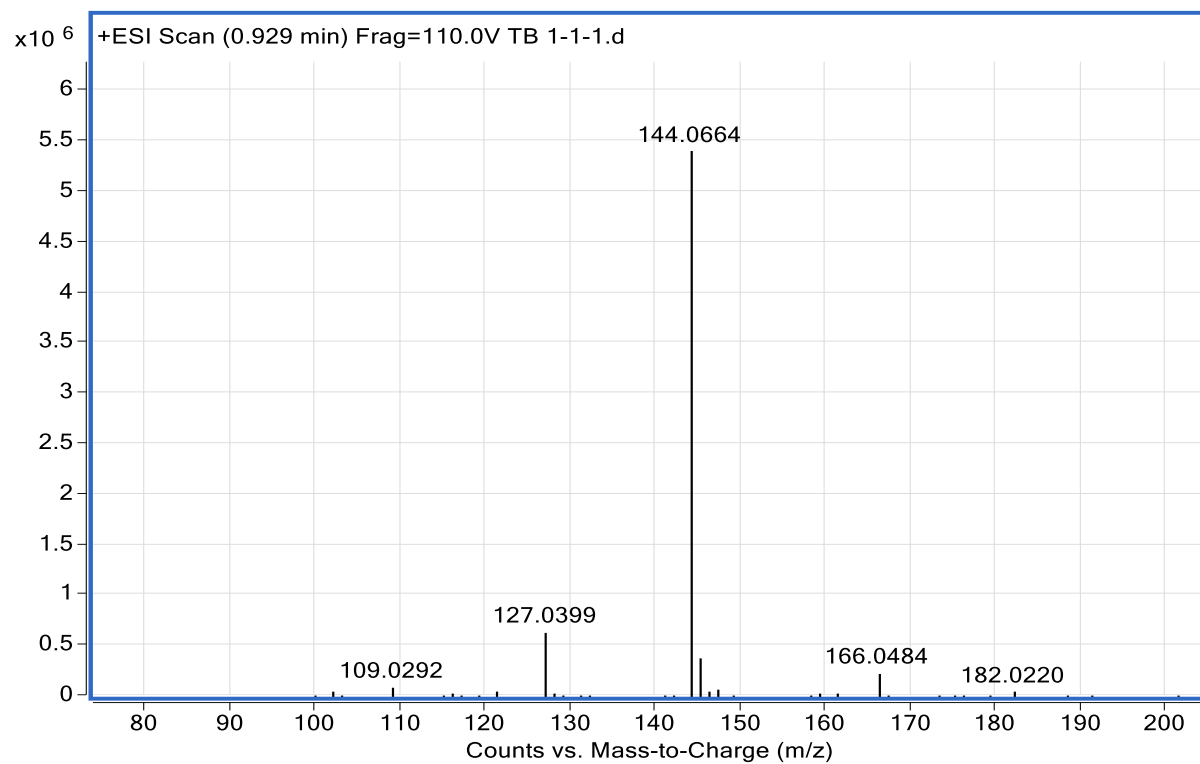


Fig. S134. MS spectrum of compound **47**

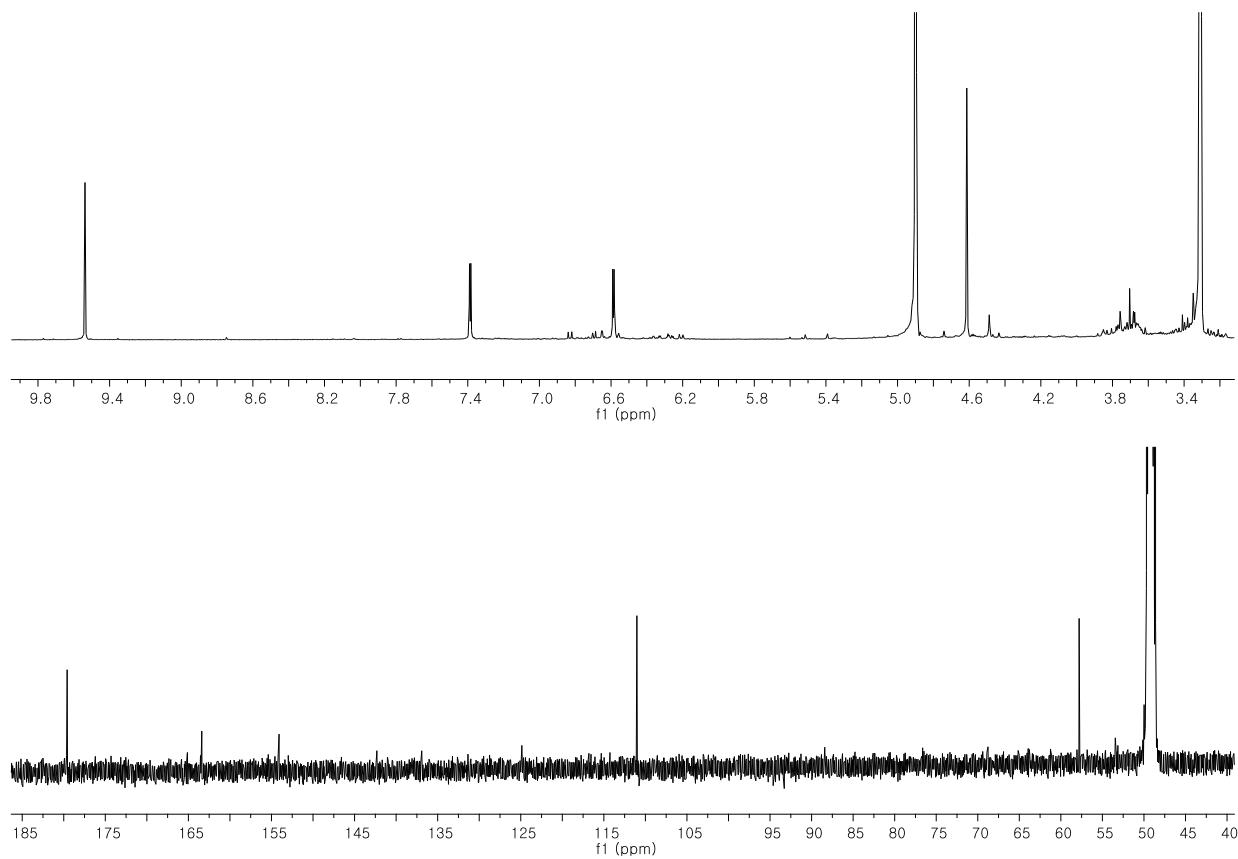


Fig. S135. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **48**

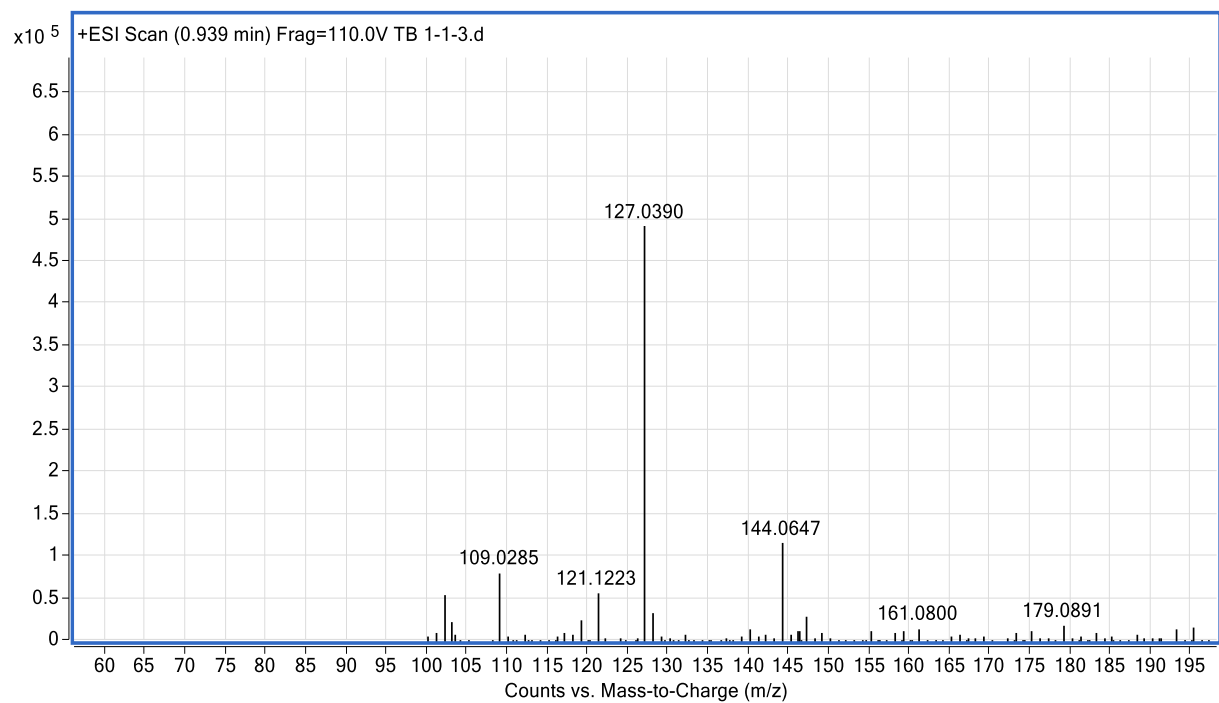


Fig. S136. MS spectrum of compound **48**

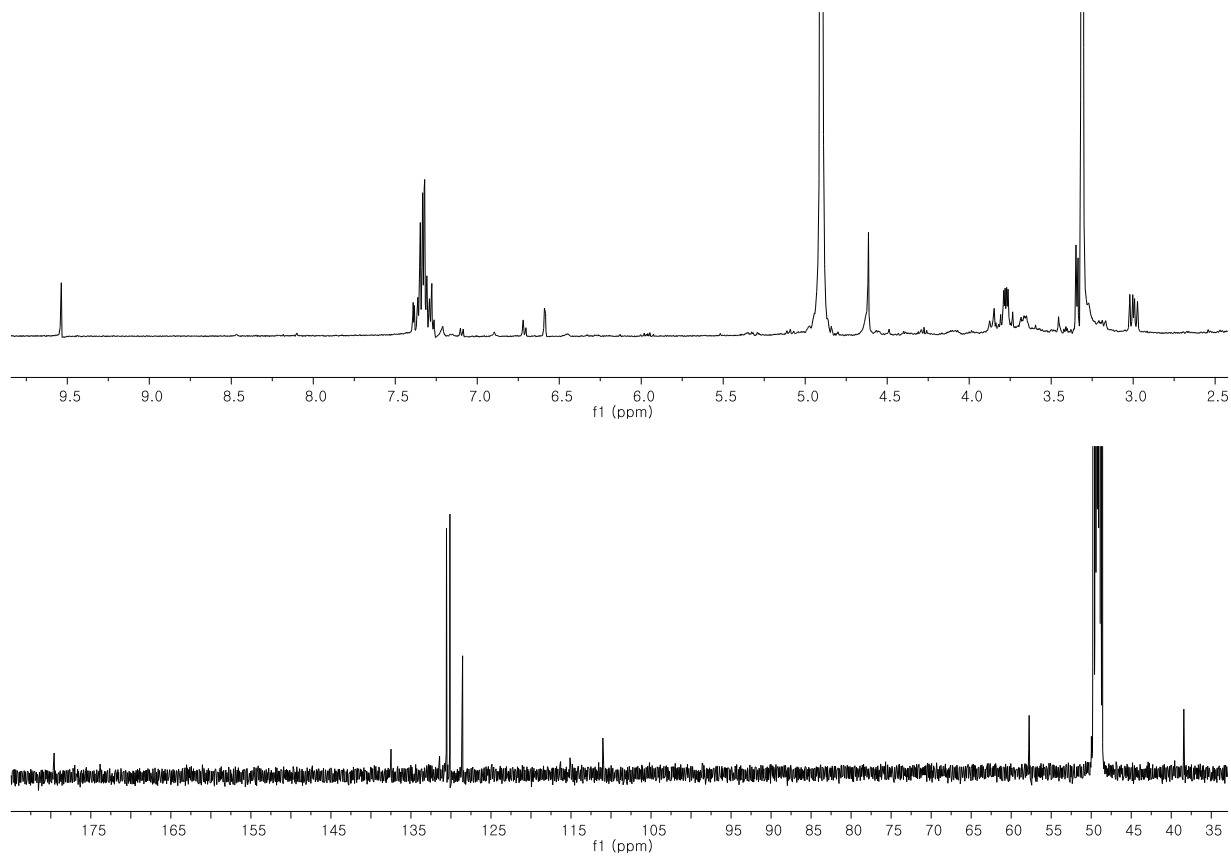


Fig. S137. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of compound **49**

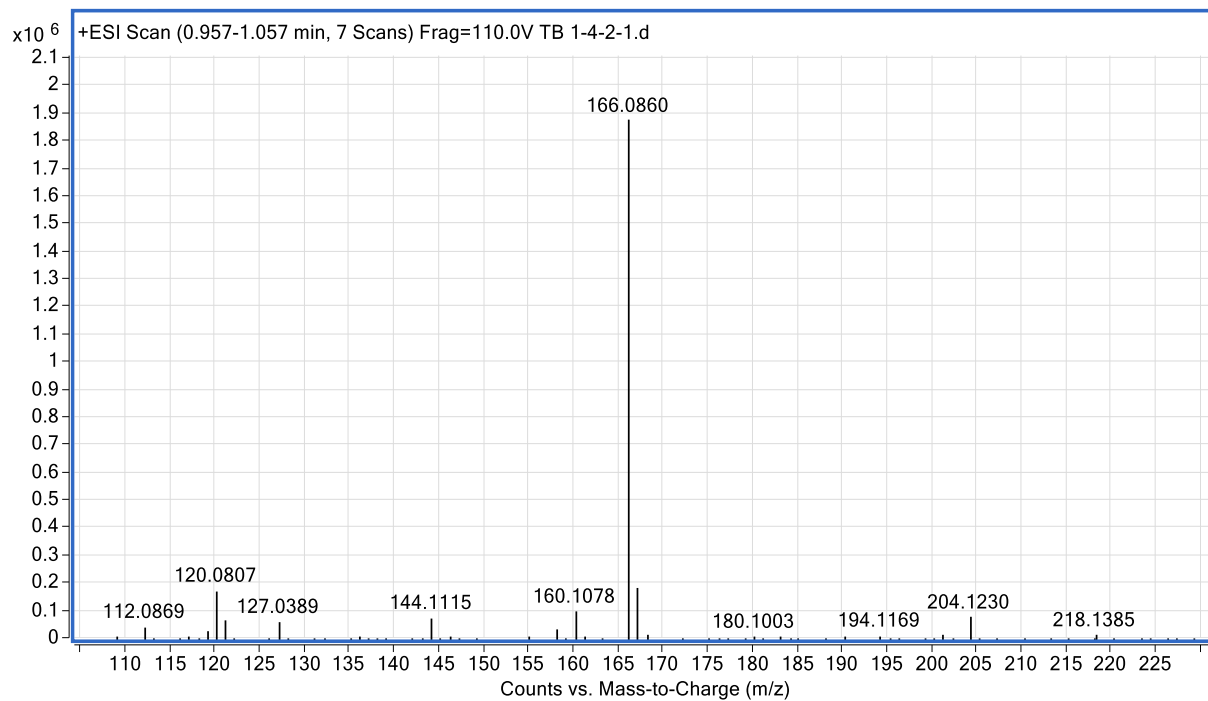


Fig. S138. MS spectrum of compound **49**